

PLANTA DE PRODUCCIÓ DE FORMALDEHID

PROJECTE DE FINAL DE GRAU
Enginyeria Química

Juny 2026

Tomás Cabeza Rabadán
Anna Del Río Duran
Arnau Martínez Valle
Júlia Pons Salvatella
Víctor Rico Fernández
Edgar Jordan Delgado

TUTOR
Rafa Bosch Palacios

PLANTA DE PRODUCCIÓ DE FORMALDEHID

PROJECTE DE FINAL DE GRAU
Enginyeria Química

CAPÍTOL 11: MANUAL DE
CÀLCUL



Taula de contingut

11. Manual de càlcul.	3
11.1. Tanc d'emmagatzematge.	3
11.1.1 Tanc d'emmagatzematge de metanol.	3
11.1.1.1 Pressió del tanc.	4
11.1.1.2 Càlcul de l'espessor del cos del tanc.	5
11.1.1.3 Càlcul de l'espessor del fons i del capçal.	6
11.1.1.4. Pes del tanc buit i en operació.	7
11.1.1.5. Selecció de materials.	8
11.1.1.6. Cubetes de retenció.	8
11.1.1.7. Sistema de blanketing.	9
11.1.2. Tanc d'emmagatzematge de formaldehid.	10
11.1.2.1. Pressió del tanc.	11
11.1.2.2. Càlcul de l'espessor del cos del tanc.	11
11.1.2.3. Càlcul de l'espessor del fons i del capçal.	11
11.1.2.4. Pes del tanc buit i en operació.	12
11.1.2.5. Selecció de materials.	12
11.1.2.6. Cubetes de retenció.	12
11.1.2.7. Sistema de blanketing.	13
11.2 Reactor	13
11.2.1 Balanç de matèria.	14
11.2.2 Balanç d'energia.	14
11.2.3 Calor generada.	15
11.2.4 Caiguda de pressió.	15
11.2.5 Cinètica de la reacció.	17
11.2.6 Paràmetres termodinàmics.	19
11.2.7 Codi MATLAB 1.	21
11.2.8 Resultats codi MATLAB 1.	25
11.2.9 Codi MATLAB 2.	26
11.2.10 Dimensionament de la carcassa.	30
11.3 Columna d'absorció.	35
11.3.1 Mòdul de Hatta.	35
11.3.2 Dimensionament de la columna.	36
11.3.2.1 Dimensionament de la columna amb el mètode NUT HUT.	36
11.3.2.2 Dimensionament de la columna amb el simulador Aspen Hysys.	39
11.3.2.3 Dimensionament accessoris columna.	43
11.4.2.3.1 Part inferior de la columna.	43
11.3.2.3.2 Part superior de la columna i alçada total.	45
11.3.2.3.3 Altres paràmetres de disseny.	45
11.4 Canonades	50

11.4.1 Dimensionament de les canonades	50
11.4.2 Pèrdues de carrega en canonades amb fluids incompressibles	51
11.4.3 Pèrdues de carrega en canonades amb fluids compressibles.....	56
11.4.4 Accidents en canonades amb fluid compressibles	58
11.4.5 Aïllants tèrmics	59
11.5 Bombes	60
11.5.1 Carrega hidrodinàmica	60
11.5.2 Potència de la bomba	61
11.5.3 Diferència de pressió de la bomba.....	62
11.6. Sistema d'impulsió d'aire.....	63
11.7. Oxidador tèrmic regeneratiu	65
11.8. Bescanviadors de calor	71
11.9. Serveis	78
11.12 Bibliografia	79

11. Manual de càlcul.

11.1. Tanc d'emmagatzematge.

Els tancs d'emmagatzematge no són simples equips que es compren a la deriva sense un previ disseny, sinó que són els primers equips els quals comencen amb la producció de formaldehid.

A continuació s'explicarà el procés emprat per dissenyar els tancs, on es presenta un exemple de càlcul per a cada tanc d'emmagatzematge.

Tots els tancs han estat dissenyats seguint les normatives ASME i API, així com les instruccions tècniques complementàries del reglament APQ corresponents. També, s'ha tingut en compte la normativa ATEX i els requeriments de la directiva Seveso per a l'emmagatzematge de substàncies perilloses, garantint la seguretat a tota la planta.

11.1.1 Tanc d'emmagatzematge de metanol.

FormalAir compta amb dos tancs de metanol amb una capacitat de 500 m^3 , aquests 1000 m^3 permeten subministrar una setmana de metanol. On s'ha tingut en compte que els camions no poden circular els caps de setmana.

Pel cas de metanol, FormalAir rep 12 camions per dia durant tres dies setmanals a través de tres línies de descarrega de camions cisterna.

Cada línia de descarrega opera a $45 \text{ m}^3/\text{h}$, on el sistema acaba assolint un màxim de $135 \text{ m}^3/\text{h}$ en cas d'operació simultània.

Per calcular el volum total per 6 dies s'ha utilitzat l'Equació 11.1.

$$V_t = Q \cdot t \quad (1)$$

On:

$$V_t = \text{Volum total (m}^3\text{)}$$

$$Q = \text{Caudal} \left(\frac{\text{m}^3}{\text{dia}} \right)$$

$$t = \text{Temps desitjat (dia)}$$

$$V_t = 154,32 \cdot 6 = 925,93$$

Per tenir marge de seguretat s'han acabat dissenyant dos tancs amb $500m^3$ cadascun.

Sabent el volum de cada tanc, s'ha utilitzat l'Equació 11.2 per saber les seves dimensions.

$$V_{tanc} = \frac{D_i^2 \cdot h \cdot \pi}{4} \quad (2)$$

On:

V_{tanc} = Volum intern de cada tanc (m^3)

D_i = Diametre intern (m)

h = altura (m)

Sent cada tanc exactament de; $500m^3 = \frac{D_i^2 \cdot h \cdot \pi}{4};$

La altura i el diàmetre dels tancs serà de 8,6 metres.

11.1.1.1 Pressió del tanc.

Per calcular l'espessor del cos del tanc es imprescindible saber quina es la pressió exercida pel propi líquid, on es calcula a partir de l'equació 11.3 i l'Equació 11.4.

$$\Delta P = \rho_{liq} \cdot g \cdot h_{liq} \quad (3)$$

ΔP = Increment de pressió del tanc (Pa)

ρ_{liq} = densitat del líquid ($\frac{kg}{m^3}$)

g = gravetat ($\frac{m}{s^2}$)

h_{liq} = altura líquid (m)

L'equació 11.4 s'utilitza per saber la pressió de disseny.

$$P = (\Delta P + P_{tanc}) \cdot 1,15 \quad (4)$$

On:

$P = \text{Pressió disseny (Pa)}$

$P_{\text{tanc}} = \text{Pressió dins del tanc (Pa)}$

$1,15 = \text{Factor de seguretat (adimensional)}$

On s'obté com a resultat;

$$\Delta P = 792 \cdot 9,81 \cdot 8,6 = 66818 \text{ Pa}$$

$$P = (66818 + 101325) \cdot 1,15 = 193364 \text{ Pa}$$

Per qüestions de seguretat la pressió de disseny serà de 2,5 bar.

11.1.1.2 Càlcul de l'espessor del cos del tanc.

Els tancs, al ser recipients de pressió interna, s'ha utilitzat l'Equació 11.5 seguint el codi ASME VIII-1 per calcular l'espessor mínim requerit.

$$t_t = \frac{P \cdot r_i}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} \quad (5)$$

On :

$P = \text{Pressió de disseny (MPa)}$

$t_t = \text{espessor del tanc (mm)}$

$r_i = \text{radi intern (mm)}$

$S = \text{tensió admissible del material (MPa)}$

$E = \text{Eficiència de la junta}$

$$t_t = \frac{0,193364 \cdot 4300}{115 \cdot 1 - 0,6 \cdot 0,193364} = 7,23mm$$

Un cop s'obté aquest valor, s'ha de sumar 2mm degut a la tolerància de fabricació i 3 mm degut al factor de corrosió del metanol.

S'obté un espessor del cos del tanc total de 12,23 mm.

11.1.1.3 Càlcul de l'espessor del fons i del capçal.

Tant pel fons com pel capçal s'han utilitzat formes el·líptiques. Per calcular l'espessor del fons s'ha utilitzat l'Equació 11.6 . La diferència entre ambdues equacions és la pressió, ja que en el cas del fons, s'ha de tenir en compte la pressió exercida pel propi líquid.

$$t_z = \frac{P_z \cdot r_i}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} \quad (6)$$

On:

t_z =espessor del fons (mm)

P_z = Pressió en z (MPa)

P =Pressió de disseny (MPa)

r_i = radi intern (mm)

S = tensió admissible del material (MPa)

E = Eficiència de la junta

$$t_z = \frac{0,193364 \cdot 4300}{2 \cdot 115 \cdot 1 - 0,2 \cdot 0,193364} = 3,62mm$$

Sumant el valor de tolerància de fabricació i el factor de corrosió, com s'ha explicat prèviament, dona un valor de 8,62mm d'espessor.

Pel cas del capçal s'utilitza l'Equació 11.7, on la pressió es centra en el propi capçal.

$$t_c = \frac{P_c \cdot r_i}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} \quad (7)$$

On:

t_c = espessor del capçal (mm)

P_c = Pressió en el capçal (Mpa)

P = Pressió de disseny (MPa)

r_i = radi intern (mm)

S = tensió admissible del material (MPa)

E = Eficiència de la junta

$$t_c = \frac{0,116524 \cdot 4300}{2 \cdot 115 \cdot 1 - 0,2 \cdot 0,116524} = 2,18 \text{ mm}$$

Sumant el valor de tolerància de fabricació i el factor de corrosió dona un valor de 7,18mm d'espessor pel capçal.

S'ha decidit utilitzar un espessor de 15 mm a tot el tanc per qüestions de seguretat i mides estàndards, ja que com s'ha calculat, el valor d'espessor del cos del tanc ha de ser mínim 12,33 mm.

11.1.1.4. Pes del tanc buit i en operació.

El pes del tanc buit en aquest ve donat pel fabricant on és de 27000 kg. El pes d'operació depèn del nivell del tanc, ja que com les descàrregues de les cisternes son discontinues, com bé s'ha explicat a l'inici del capítol, el nivell del tanc està entre un 12,5% i un 75% d'ocupació.

Per calcular el pes d'operació s'ha utilitzat l'Equació 11.8.

$$P_{op} = P_{buit} + V_{liq} \cdot \rho_{liq} \quad (8)$$

On:

P_{op} = Pes del tanc en opració (Kg)

$P_{buit} = \text{Pes del tanc buit (Kg)}$

$V_{liq} = \text{Volum del líquid (m}^3\text{)}$

$\rho_{liq} = \text{densitat del líquid (}\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\text{)}$

Es calcularà el pes mínim i màxim possible, sent d'un 12,5% en el mínim i un 75% amb el màxim.

$$P_{opmin} = 27000 + 500 * 0,125 * 787 = 76187 \text{ Kg}$$

$$P_{opmax} = 27000 + 500 * 0,75 * 787 = 322125 \text{ Kg}$$

Llavors el pes d'operació rondarà des dels 76187 Kg fins als 322125 Kg.

11.1.1.5. Selecció de materials.

A ambdós tancs de metanol de FormalAir són d'acer inoxidable AISI 316L, d'aquesta manera es garanteix la seguretat de la planta al estar treballant amb una substància altament tòxica i inflamable.

Els tancs estan aïllats amb llana de roca per mantenir la temperatura constant i el més pròxim a 25º, ja que anirà variant al llarg del any degut a que no s'ha considerat eficient invertir en cap tractament tèrmic.

11.1.1.6. Cubetes de retenció.

Les cubetes de retenció són elements obligatoris a l'hora de dissenyar tancs d'emmagatzematge per evitar l'expansió en el cas de possibles fuites. Pel cas del metanol és una substància de categoria 2 de la classe B1. Llavors per dissenyar les cubetes de retenció s'han obeït les indicacions de les ITC MIE APQ del Reial Decret 656/2017

Al haver d'emmagatzemar dos tancs de metanol i estar situats conjuntament, s'ha optat per fer una cubeta conjunta, on per raons de seguretat s'ha multiplicat el volum per 1,35.

Llavors la cubeta de retenció ha de tenir un volum de 675 m^3 , on entre els tanc hi ha una separació de seguretat de 4 metres (50% del diàmetre dels tancs). La distància mínima entre el tanc de la paret serà d'1,5 metres.

Per calcular el volum de retenció de la cubeta de retenció s'ha utilitzat l'Equació 11.9.

$$V_{cubeta} = area_{cubeta} * h_{cubeta} \quad (9)$$

On:

V_{cubeta} = Volum de retenció de la cubeta (m^3)

$area_{cubeta}$ = Area superfície cubeta (m^2)

h_{cubeta} = altura paret cubeta (m)

La superfície fa 30 metres de llargada i 15 metres d'amplada i consta d'una altura de la paret de 1,5 metres.

$$V_{cubeta} = 450 * 1,5 = 675m^3$$

Es preveu dissenyar la cubeta de retenció amb un 1% de pendent. També que sigui construïda amb formigó armat i amb additiu hidròfug juntament amb un revestiment interior de pintura epòxica. Els tancs també compten amb sistemes de posada a terra on s'ha optat per una pica de terra amb ponts d'unió a totes les brides.

11.1.1.7. Sistema de blanketing.

Els sis tancs compten amb un sistema de blanketing per evitar tant variacions de pressions brusques al realitzar càrregues i descàrregues com possibles entrades d'aire en els mateixos, efectuant així una sobrepressió als tancs de 50 mbar respecte l'atmosfèrica.

Per saber la quantitat de nitrogen que ha de ser subministrat en els tancs de metanol s'ha utilitzat l'Equació 11.10, seguint les normatives API.

$$Q_{Nitrogen} = 0,0035 * V_{tanc}^{0,9} + Q_s * 1,2 \quad (10)$$

On:

$$Q_{Nitrogen} = \text{Cabal de nitrogen necessari} \left(\frac{m^3}{h} \right)$$

$V_{tanc} = \text{Volum del tanc (m}^3\text{)}$

$Q_s = \text{Cabal sortida del liquid (}\frac{\text{m}^3}{\text{h}}\text{)}$

Llavors el caudal màxim de nitrogen requerit serà:

$$Q_{Nitrogen} = 0,0035 * 500^{0,9} + 19,5 * 1,2 = 24,34 \text{ m}^3/\text{h}$$

Per recomanacions de la normativa API i augmentar la seguretat, s'ha decidit tenir un cabal de 30 m³/h de nitrogen gasos en condicions màximes i en un circuit tancat.

11.1.2. Tanc d'emmagatzematge de formaldehid.

FormalAir consta de quatre tancs de formaldehid amb una capacitat de 500 m³, aquests 2000 m³ permeten tenir una capacitat d'emmagatzematge suficient per 5 dies laborables, ja que s'ha tingut en compte que els camions no poden circular els caps de setmana.

Pel cal del formaldehid, FormalAir rep 16 camions per dia els 5 dies de la setmana, comptant amb quatre línies de carrega de camions cisterna, on són carregats amb una solució de 33 Tn.

Cada línia de descarrega opera a 40 m³/h, on pot arribar fins 160 m³/h en cas d'estar les quatre línies operant simultàniament.

Per calcular el volum total per 5 dies s'ha utilitzat l'Equació 11.1.

$$V_t = 329,95 \cdot 5 = 1649,75 \text{ m}^3$$

Per tenir marge de seguretat s'han dissenyat quatre tancs amb 500m³ cadascun.

Al tenir el mateix volum que els tancs de metanol, el càlcul de les dimensions és el mateix vist a l'apartat 11.2.1. *Tanc d'emmagatzematge de metanol.*

11.1.2.1. Pressió del tanc.

Per calcular l'espessor del cos del tanc s'ha utilitzat l'Equació 11.3 i l'Equació 11.4 vistes anteriorment.

$$\Delta P = 872 \cdot 9,81 \cdot 8,6 = 73567 \text{ Pa}$$

$$P = (73567 + 101325) \cdot 1,15 = 201126 \text{ Pa}$$

Per qüestions de seguretat la pressió de disseny serà de 2,5 bar.

11.1.2.2. Càlcul de l'espessor del cos del tanc.

S'ha utilitzat l'Equació 11.5 vista anteriorment pel cas del metanol, sent:

$$t_t = \frac{0,201125 \cdot 4300}{115 \cdot 1 - 0,6 \cdot 0,201125} = 7,53 \text{ mm}$$

Amb els valors afegits de la tolerància de fabricació i al factor de corrosió s'obté un espessor del cos del tanc de 12,53 mm.

11.1.2.3. Càlcul de l'espessor del fons i del capçal.

Per calcular l'espessor del capçal i del fons s'ha utilitzat l'Equació 11.6 i l'Equació 11.7 vistes a l'apartat

11.2.1.3. Càlcul de l'espessor del fons i del capçal.

On s'obtenen uns valors de;

$$t_z = \frac{0,201125 \cdot 4300}{2 \cdot 115 \cdot 1 - 0,2 \cdot 0,201125} = 3,76 \text{ mm}$$

$$t_c = \frac{0,116524 \cdot 4300}{2 \cdot 115 \cdot 1 - 0,2 \cdot 0,116524} = 2,18 \text{ mm}$$

On sumant toleràncies de fabricació i corrosió dona un valor de 8,76 mm pel fons i 7,18 mm pel capçal.

Per raons de seguretat s'ha decidit utilitzar un espessor de 15 mm a tot el tanc, de la mateixa manera que en el cas dels tancs del formaldehid.

11.1.2.4. Pes del tanc buit i en operació.

Pel cas dels tancs de formaldehid, el pes del tanc buit també ve donat pel fabricant, sent de 26340 Kg.

Per calcular el pes operatiu, s'ha establert els nivells on romandrà el tanc degut a l'entrada continua de producte i la descarrega discontinua als camions cisterna. On els tancs variaran d'un 12,5% fins a un 50%.

Per calcular el pes d'operació s'ha utilitzat novament l'Equació 11.8.

$$P_{op} = 26340 + 500 \cdot 0,125 \cdot 872 = 80840 \text{ Kg}$$

$$P_{op} = 26340 + 500 \cdot 0,5 \cdot 872 = 244340 \text{ Kg}$$

Llavors el pes d'operació del tanc variarà des de 80840 Kg fins a 244340 Kg.

11.1.2.5. Selecció de materials.

Els quatre tancs de formaldehid de FormalAir són d'acer inoxidable AISI 316L.

Estan aïllats amb llana de roca per mantenir la temperatura constant i el més pròxim a 25°, per evitar possibles variacions al llarg del any.

11.1.2.6. Cubetes de retenció.

De la mateixa manera que pels tancs de metanol, els tancs de formaldehid també han de tenir cubetes de retenció. S'ha utilitzat una cubeta conjunta pels quatre tancs de formaldehid, on el valor mínim segons les ITC MIE APQ del Reial Decret 656/2017 és de 675 m³. Per qüestions de seguretat s'ha optat per realitzar una conjunta de 1734 m³.

El volum de retenció s'ha calculat amb l'Equació 11.9, on l'àrea consta de 34m per 34m.

$$V_{cubeta} = 1156 * 1,5 = 1734m^3$$

Tal i com s'ha realitzat en el cas de la cubeta de retenció pel cas del metanol, es preveu dissenyar la cubeta de retenció amb un 1% de pendent. També que sigui construïda amb formigó armat i amb additiu hidròfug juntament amb un revestiment interior de pintura epòxica. Els tancs també compten amb sistemes de posada a terra on s'ha optat per una pica de terra amb ponts d'unió a totes les brides.

11.1.2.7. Sistema de blanketing.

Per el càlcul del nitrogen necessari pels tancs de formaldehid s'ha utilitzat l'Equació 11.10, utilitzada a l'apartat 11.2.1.7. *Sistema de blanketing*. On el cabal de sortida és de 40m³/h degut als camions cisterna.

$$Q_{Nitrogen} = 0,0035 * 500^{0,9} + 40 * 1,2 = 48,94 m^3/h$$

En aquest cas la sortida de producte no és constant a diferència del cas del metanol, per aquest motiu el cabal màxim necessari és major, encara que no sigui constant.

Per recomanacions de la normativa API i augmentar la seguretat, s'ha decidit tenir un cabal de 60 m³/h de nitrogen gasos en condicions màximes i en un circuit tancat.

11.2 Reactor

Degut a que la producció de Formaldehid a partir de Metanol i Aigua és un procés àmpliament estudiat i parametritzat, existeixen nombrosos estudis diferents sobre la cinètica de la reacció, calor de reacció i comportament del catalitzador. Segons els objectius o condicions de la planta, s'utilitzaran certs paràmetres o altres, els quals es trobaran recolzats bibliogràficament en tot cas.

És important esmentar la ràpida velocitat de reacció que s'assoleix en aquest procés així com la gran quantitat de calor alliberada per mol de reactiu, és per aquest motiu que presenta nombroses equacions per la transmissió de calor, a través del catalitzador, del tub i del líquid refrigerant.

A més, cal afegir que al tractar-se d'un reactor heterogeni (gas i catalitzador sòlid) hi haurà una pèrdua de pressió important a través del reactor.

Les equacions que ens permeten calcular els fenòmens esmentats anteriorment es presenten a continuació. Els càlculs i simulacions del reactor s'ha realitzat mitjançant MATLAB.

11.2.1 Balanç de matèria

Pel disseny del reactor s'ha utilitzat l'Equació 11.11. per realitzar el balanç de matèria.

$$\frac{dF_i}{dz} = \sum \left((v_{ij} \cdot r_j) \cdot (\rho_b \cdot A_t \cdot f_{cat}) \right) \quad (11)$$

On:

z : Coordenada axial (longitud) del tub [m]

F_i : Cabal molar del component i $\left[\frac{\text{mol}}{\text{s}} \right]$

v_{ij} : Coeficient estequiomètric del component i en la reacció j

r_j : Velocitat de la reacció j $\left(\frac{\text{mol}}{\text{kg}_{cat} \cdot \text{s}} \right)$

ρ_b : Densitat del llit catalític (partícules actives+inert) $\left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$

A_t : Àrea de la secció transversal interna del tub (m^2)

f_{cat} : Fracció volumètrica de catalitzador actiu al llit [adimensional]

11.2.2 Balanç d'energia

Pel disseny del reactor s'ha utilitzat l'Equació 11.12 per realitzar el balanç d'energia.

$$\frac{dT}{dz} = \frac{Q_{gen} - Q_{ext}}{F_t \cdot C_{p,gas}} \quad (12)$$

On:

T : Temperatura de la mescla gasosa $[K]$.

F_t : Cabal molar total de la mescla $\left[\frac{mol}{s}\right]$

$C_{p,gas}$: Capacitat calorífica molar de la mescla $\left[\frac{J}{mol \cdot K}\right]$

Q_{gen} : Calor generada per les reaccions químiques per unitat de longitud $\left[\frac{W}{m}\right]$

Q_{ext} : Calor extreta pel sistema de refrigeració per unitat de longitud $\left[\frac{W}{m}\right]$

11.2.3 Calor generada

Per calcular els valors de la calor generada i la calor extreta s'ha utilitzat les Equacions 11.13 i 11.14 respectivament.

$$Q_{gen} = \sum [r_j \cdot (-\Delta H_{rxnj})] \cdot (\rho_b \cdot A_t \cdot f_{cat}) \quad (13)$$

On:

ΔH_{rxnj} = Entalpia de la reacció j $\left[\frac{J}{mol}\right]$

$$Q_{ext} = U \cdot \pi \cdot D_t \cdot (T - T_a) \quad (14)$$

On:

U : Coeficient global de transferència de calor $\left[\frac{W}{m^2 \cdot K}\right]$

D_t : Diàmetre intern del tub $[m]$

T_a : Temperatura del fluid refrigerant $[K]$

11.2.4 Caiguda de pressió

Per determinar la caiguda de pressió de la mescla gasos a través del reactor s'ha utilitzat la Equació 11.15 d'Ergun:

$$\frac{dP}{dz} = -\alpha \cdot P_0 \cdot \left(\frac{F_t}{F_{t0}}\right) \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right) \cdot \left(\frac{1}{2 \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)}\right) \cdot (\rho_b \cdot A_t) \quad (15)$$

On:

P : Pressió del gas al punt z [atm]

P_0 : Pressió del gas a l'entrada del reactor [atm]

F_{t0} : Cabal molar total a l'entrada $\left[\frac{mol}{s}\right]$

T_0 : Temperatura del gas a l'entrada [K]

α : Paràmetre de resistència al flux d'Ergun $\left[\frac{atm}{kg}\right]$

Per calcular el paràmetre de resistència al flux, es pot utilitzar l'equació per la seva estimació trobada a la font bibliogràfica [10] i que es mostra a les Equacions 16 i 17.

$$\alpha = \frac{2 \cdot \beta_0}{A_c \cdot \rho_c \cdot (1 - \phi) \cdot P_0} \quad (16)$$

On:

A_c : Àrea transversal del tub [m^2]

ρ_c : Densitat sòlida del catalitzador $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$

ϕ : Porositat del llit

P_0 : Pressió inicial [Pa]

$$\beta_0 = \frac{G \cdot (1 - \phi)}{\rho_0 \cdot D_p \cdot \phi^3} \left[\frac{150 \cdot (1 - \phi) \cdot \mu}{D_p} + 1,75 \cdot G \right] \quad (17)$$

On:

G : Velocitat massica superficial $\left[\frac{kg}{s \cdot m^2} \right]$

D_p : Diàmetre de la partícula $[m]$

μ : Viscositat dinàmica del gas $\left[\frac{kg}{m \cdot s} \right]$

Si s'agrupen les equacions d'alfa i beta, es simplifica i es substitueixen a l'expressió de pèrdua de pressió d'Ergun s'obté una expressió com la següent (Equació 11.18):

$$\frac{dP}{dz} = - \frac{G}{\rho_{gas} \cdot D_p} \cdot \frac{1-\phi}{\phi^3} \cdot \left[\frac{150 \cdot (1-\phi) \cdot \mu}{D_p} + 1,75 \cdot G \right] \quad (18)$$

Aquesta expressió serà la utilitzada al codi de Matlab degut a la seva senzillesa.

11.2.5 Cinètica de la reacció

Pel que fa a la cinètica de reacció, s'han utilitzat les equacions de Deshmukh et al. (2005). Degut a que s'han considerat dues reaccions en sèrie al catalitzador, existeixen dues equacions, la respectiva a la formació de formaldehid i la que fa referència a la producció de monòxid de carboni, Equació 11.19 i Equació 11.20 respectivament.

$$r_1 = K_{HCHO} \cdot \theta_{CH_3OH} \cdot \theta_{O_2} \quad (19)$$

$$r_2 = K_{CO} \cdot \theta_{O_2} \cdot \theta_{HCHO} \quad (20)$$

On:

r_1 : Velocitat de formació de formaldehid (reacció 1) $\left[\frac{mol}{kg_{cat} \cdot s} \right]$

r_2 : Velocitat de formació de monòxid de carboni (reacció 2) $\left[\frac{\text{mol}}{\text{kg}_{\text{cat}} \cdot \text{s}} \right]$

θ_i : Fracció de llocs actius ocupats per l'espècie i [adimensional]

K_i : Constants cinètiques de reacció

Per calcular els termes d'adsorció (Theta) s'han utilitzat les Equacions 11.21, 11.22, 11.23.

$$\theta_{CH_3O} = \frac{K_{CH_3O} \cdot P_{CH_3O}}{1 + K_{CH_3O} \cdot P_{CH_3O} + K_{H_2O} \cdot P_{H_2O}} \quad (21)$$

$$\theta_{O_2} = \frac{K_{O_2} \cdot \sqrt{P_{O_2}}}{1 + K_{O_2} \cdot \sqrt{P_{O_2}}} \quad (22)$$

$$\theta_{HCHO} = \frac{P_{HCHO}}{1 + K_{CH_3O} \cdot P_{CH_3O} + K_{H_2O} \cdot P_{H_2O}} \quad (23)$$

On:

K_i : Constant d'equilibri d'adsorció de l'espècie i

P_i : Pressió parcial de l'espècie i [atm]

Com s'ha comentat anteriorment, durant el procés, s'allibera una gran quantitat de calor i degut a que el reactor dissenyat no és isoterm, es produeixen unes significatives variacions de temperatura. És per això que s'ha de tenir en compte l'efecte de la temperatura sobre les constants cinètiques i d'adsorció, aquesta dependència de la temperatura es duu per Arrhenius i es mostra a l'Equació 11.24.

$$K_i = K_{i,0} \cdot e^{-\frac{E_{a,i}}{R \cdot T}} \quad (24)$$

On:

$K_{i,0}$: Factor pre – exponencial

$E_{a,i}$: Energia d'activació de la reacció o adsorció $\left[\frac{J}{mol} \right]$

R : Constant universal dels gasos ideals $\left[8,314 \frac{J}{mol \cdot K} \right]$

11.2.6 Paràmetres termodinàmics

La capacitat calorífica de cada component i per tant de la mescla també es veu afectada per la temperatura, segons la equació de Shomate, Equació 11.25.

$$C_{p,i} = A_i + B_i \cdot t + C_i \cdot t^2 + D_i \cdot t^3 + \frac{E_i}{t^2} \quad (25)$$

On:

$C_{p,i}$: Capacitat calorífica molar del component i $\left[\frac{J}{mol \cdot K} \right]$

t : Temperatura normalitzada $\left(\frac{T}{1000} \right) \left[\frac{K}{1000} \right]$

A, B, C, D, E : Coeficients empírics del NIST per a cada gas

I per calcular la capacitat calorífica del gas amb les de cada component i les seves composicions s'utilitza l'Equació 11.26.

$$C_{p,gas} = \sum (y_i \cdot C_{p,i}) \quad (26)$$

On:

y_i : Fracció molar del component i a la mescla

Per calcular el C_p mitjà s'ha utilitzat la temperatura més baixa a la que es troba la mescla reactiva al reactor, 498K.

Normalitzada queda amb un valor de 0,498.

A la taula següent es mostren els valors dels coeficients empírics de NIST per a cada gas (Taula 11.1).

Taula 11.1. Coeficient de NIST per diferents components.

Component	Coeficient de NIST				
	A	B	C	D	E
Metanol	21,15288	70,92661	25,87611	-62,22812	0,019184
Oxigen	30,03235	8,772972	-3,988133	0,788313	-0,741599
Nitrogen	19,50583	19,88705	-8,598535	1,369784	0,527601
Aigua	-203,606	1523,29	-3196,413	2474,455	3,855326
Formaldehid	0,19561	79,72338	-45,15238	11,10593	-0,58064
Monòxid de carboni	25,56759	6,09613	4,054656	-2,671301	0,131021

Del reactor es poden extreure les composicions mitjanes de cada component, es mostren a la Taula 11.2

Taula 11.2. Composicions mitjanes de cada component al reactor.

Composicions mitjanes (y_i)
CH ₃ OH
0,0934
O ₂
0,1675
HCHO
0,0408
H ₂ O
0,0409
CO
0,0003
N ₂
0,6574

Si es substitueixen les dades anteriors i es calculen els C_p per a cada component al a temperatura desitjada i el C_p global de gas (Taula 11.3):

Taula 11.3. Resultats dels C_p individuals i globals per la mescla gasosa a 498K.

C_p (CH ₃ OH) [J/mol·K]
59,1896
C_p (O ₂) [J/mol·K]
31,0070
C_p (HCHO) [J/mol·K]
43,4628
C_p (H ₂ O) [J/mol·K]
35,1335
C_p (CO) [J/mol·K]
29,7617
C_p (N ₂) [J/mol·K]
29,9943
C_p global gas (J/mol·K)
33,6594

S'observa doncs com el C_p global mitjà del gas té un valor de 33,65 J/mol·K. S'arrodonirà aquest valor a 35 J/mol·K.

A continuació es tracten els paràmetres de transmissió de calor.

S suposat que la resistència per convecció de la part del refrigerant i la conducció del tub son negligibles en comparació amb la transmissió de calor a través del gas i catalitzador. S'ha decidit agafar un valor bibliogràfic típic per circulació de gasos a través de tubs empacats de 150 W/m²·K.

11.2.7 Codi MATLAB 1

Un cop es tenen en consideració totes les equacions de balanç de matèria, energia, pressió, estimació de paràmetres entres d'altres, s'ha optat per solucionar el sistema mitjançant el programa MATLAB degut a la seva utilitat a l'hora de resoldre equacions diferencials, a continuació es mostra el codi complet que simula el comportament del reactor a les condicions fixades per aquest.

```
function simulacio_reactor_TFG_Complet_Un_Sol_Tub_Amb_Inert_Amb_Tub_Curt()
% 1. CONDICIONS INICIALS
% GEOMETRIA DEL REACTOR MULTITUBULAR
Dt = 0.02621; % Diàmetre tub (m)
Num_Tubs = 10000;
Long_Tub = 2; %Longitud tub (m)
Ta = 473; % Temperatura refrigerant [K]
z_span = [0 Long_Tub];
% CABALS INICIALS PER A UN SOL TUB
```

```

Fte_min_total = 32623.91;
Fte_min_tub = Fte_min_total / Num_Tubs; % Cabal a un tub [mol/min]
Fte_s_tub = Fte_min_tub / 60; % En [mol/s]
y_m0 = 0.0854;
y_air = 1 - y_m0;
y_O2_0 = y_air * 0.21;
y_N2_0 = y_air * 0.79;
% Cabals molars inicials F_i0 [mol/s]
F_CH3OH_0 = y_m0 * Fte_s_tub;
F_O2_0 = y_O2_0 * Fte_s_tub;
F_HCHO_0 = 0;
F_H2O_0 = 0;
F_CO_0 = 0;
P_0 = 2; % Pressió inicial [atm]
T_0 = 430; % Temperatura inicial del gas [K]
% Vector Y0: [CH3OH, O2, HCHO, H2O, CO, P, T]
Y0 = [F_CH3OH_0; F_O2_0; F_HCHO_0; F_H2O_0; F_CO_0; P_0; T_0];
% Resolució amb ode15s
[z, Y] = ode15s(@equacions_diferencials, z_span, Y0);
% 2. EXTRACCIÓ I CàLCUL DE RESULTATS
F_CH3OH = Y(:, 1);
F_O2 = Y(:, 2);
F_HCHO = Y(:, 3);
F_H2O = Y(:, 4);
F_CO = Y(:, 5);
P = Y(:, 6);
T = Y(:, 7);
% Rendiment, Conversió i Selectivitat globals
Conversio = (F_CH3OH_0 - F_CH3OH) ./ F_CH3OH_0;
Selectivitat = F_HCHO ./ (F_HCHO + F_CO + 1e-6);
U = 150; % Coeficient global de transferència de calor [W/m2*K]
F_final = F_CH3OH(end) + F_O2(end) + F_HCHO(end) + F_H2O(end) + F_CO(end);
fprintf('Cabal molar sortida', F_final)
% Per al càlcul de la calor alliberada
Q_extret_per_metre = U * pi * Dt * (T - Ta); % [W/m] per a un tub
Q_un_tub = trapz(z, Q_extret_per_metre); % Integral al llarg de L [W]
Q_total_planta = Q_un_tub * Num_Tubs; % Calor total del reactor [W]
fprintf('Resultats a la sortida del tub (z = %d m):\n', Long_Tub);
fprintf('- Conversió de Metanol: %.2f %%\n', Conversio(end) * 100);
fprintf('- Selectivitat cap a HCHO: %.2f %%\n', Selectivitat(end) * 100);
fprintf('Cabal molar sortida Metanol: %.5f \n', F_CH3OH(end) );
fprintf('Cabal molar sortida Formaldehid: %.5f \n', F_HCHO(end) )
fprintf('Calor total planta: %.2f W\n', Q_total_planta)
fprintf('Cabal molar sortida Monòxid: %.5f \n', F_CO(end))
fprintf('Cabal molar sortida Aigua: %.5f \n', F_H2O(end))
fprintf('Cabal molar sortida O2: %.5f \n', F_O2(end))
% 3. GRAFIQUES
figure(1)
% Subplot 1: Perfil de Cabals
plot(z, F_CH3OH, 'b', z, F_HCHO, 'g', z, F_CO, 'r', 'LineWidth', 2);
xlabel('Longitud del tub (z) [m]'); ylabel('Cabal molar [mol/s]');

```

```

legend('CH3OH (Reactiu)', 'HCHO (Producte)', 'CO (Subproducte)', 'Location',
'best');
title('Evolució d''Espècies'); grid on;
% Subplot 2: Temperatura i Pressió
figure (2)
yyaxis left
plot(z, T, '-k', 'LineWidth', 2);
yline(473, '--b', 'Temp. Refrigerant');
ylabel('Temperatura (T) [K]');
yyaxis right
plot(z, P, '-m', 'LineWidth', 2);
ylabel('Pressió (P) [atm]');
xlabel('Longitud del tub (z) [m]');
title('Perfils Termodinàmics'); grid on;
end
% SUBFUNCIÓ D'EQUACIONS
function dYdz = equacions_diferencials(z, Y)
% 1. Desempaquetar variables
F_CH3OH = max(Y(1), 0);
F_O2 = max(Y(2), 0);
F_HCHO = max(Y(3), 0);
F_H2O = max(Y(4), 0);
F_CO = max(Y(5), 0);
P = max(Y(6), 1e-6);
T = Y(7);
Num_Tubs = 10000;
Fte_s_inicial = 32623.91 / 60 / Num_Tubs;
y_m0 = 0.0854;
F_N2 = Fte_s_inicial * (1 - y_m0) * 0.79;
fprintf('Cabal molar sortida N2: %.5f \n', F_N2(end))
% PARÀMETRES TÈRMICS
dH_rxn1 = -156300; % Calor Reacció 1 [J/mol]
dH_rxn2 = -236000; % Calor Reacció 2 [J/mol]
Ta = 473; % Temperatura refrigerant [K]
U = 150; % Coeficient global estimat [W/m2*K]
rho_b = 1084; % Densitat del llit [kg/m3]
Cp_gas = 35; % Capacitat calorífica mescla [J/mol*K]
% PARÀMETRES ERGUN
Dp = 0.004; % Diàmetre equivalent de partícula [m]
phi = 0.40; % Porositat del llit
mu_gas = 2.5e-5; % Viscositat dinàmica del gas [Pa*s]
M_avg = 0.0292; % Pes molecular mitjà de la mescla [kg/mol]
% GEOMETRIA
Dt = 0.02621; % Diàmetre intern del tub [m]
At = (pi * Dt^2) / 4; % Àrea transversal d'un tub [m2]
% Càlcul de pressions parcials
Ft_actual = F_CH3OH + F_O2 + F_HCHO + F_H2O + F_CO + F_N2;
P_CH3OH = (F_CH3OH / Ft_actual) * P;
P_O2 = (F_O2 / Ft_actual) * P;
P_H2O = (F_H2O / Ft_actual) * P;
P_HCHO = (F_HCHO / Ft_actual) * P;

```

% CINÈTICA REACCIONS

```

R = 8.314;
ko_HCHO = 1.5e7; Ea_HCHO = 86000;
Ko_CH3OH = 2.6e-4; Ea_CH3OH = -56780;
Ko_O2 = 1.423e-5; Ea_O2 = -60320;
Ko_H2O = 5.5e-7; Ea_H2O = -86450;
K_HCHO = ko_HCHO * exp(-Ea_HCHO / (R * T));
K_CH3OH = Ko_CH3OH * exp(-Ea_CH3OH / (R * T));
K_O2 = Ko_O2 * exp(-Ea_O2 / (R * T));
K_H2O = Ko_H2O * exp(-Ea_H2O / (R * T));
Theta_CH3OH = (K_CH3OH * P_CH3OH) / (1 + K_CH3OH * P_CH3OH + K_H2O * P_H2O);
Theta_O2 = (K_O2 * P_O2^0.5) / (1 + K_O2 * P_O2^0.5);
r1 = K_HCHO * Theta_CH3OH * Theta_O2;
ko_CO = 3.5e2;
Ea_CO = 46000;
k_CO = ko_CO * exp(-Ea_CO / (R * T));
Theta_HCHO = P_HCHO / (1 + K_CH3OH * P_CH3OH + K_H2O * P_H2O);
r2 = k_CO * Theta_O2 * Theta_HCHO;

```

% Perfil del llit

```

if z < 0.25
f_cat = 0.0; % De 0m a 0.25m
elseif z < 0.8
f_cat = 0.55; % De 0.38m a 0.80m
elseif z < 1.4 % De 0.8m a 1.4m
f_cat = 0.7;
else
f_cat = 1; % De 1.4m a 2m
end

```

% EQUACIONS DIFERENCIALS EN DOMINI z

```

% Multiplicador per passar de dW a dz: dW = (rho_b * At * f_cat) * dz

```

```

factor_massa_activa = rho_b * At * f_cat;

```

% 1. Balanços de Matèria (mol / s * m)

```

dF_CH3OH_dz = -r1 * factor_massa_activa;
dF_O2_dz = (-0.5 * r1 - 0.5 * r2) * factor_massa_activa;
dF_HCHO_dz = (r1 - r2) * factor_massa_activa;
dF_H2O_dz = (r1 + r2) * factor_massa_activa;
dF_CO_dz = r2 * factor_massa_activa;

```

% 2. Pèrdua de pressió

```

rho_gas = ((P * 101325) * M_avg) / (8.314 * T);

```

% Velocitat màssica superficial actual [kg/(m²*s)]

```

G = (Ft_actual * M_avg) / At;

```

% Pèrdua de càrrega en [Pa/m] segons Ergun

```

dPdz_Pa = - (G / (rho_gas * Dp)) * ((1 - phi) / phi^3) * (150 * (1 - phi) *
mu_gas / Dp) + 1.75 * G );

```

% 3. Balanç d'energia

% Calor generat per reacció (W/m)

```

Q_generat_dz = (r1 * (-dH_rxn1) + r2 * (-dH_rxn2)) * factor_massa_activa;

```

% Calor extreta (W/m).

```

Q_extret_dz = U * pi * Dt * (T - Ta);
dTdz = (Q_generat_dz - Q_extret_dz) / (Ft_actual * Cp_gas);

```

```

% Conversió a [atm/m] per integrar-ho amb la teva variable P

```

```
dPdZ = dPdZ_Pa / 101325;
% Sortida del vector diferencial
dYdz = [dF_CH3OH_dz; dF_O2_dz; dF_HCHO_dz; dF_H2O_dz; dF_CO_dz; dPdZ; dTdz];
End
```

11.2.8 Resultats codi MATLAB 1

Executant el codi s'obtenen els següents perfils i dades (Figura 11.1 , Figura 11.2, Taula 11.4)

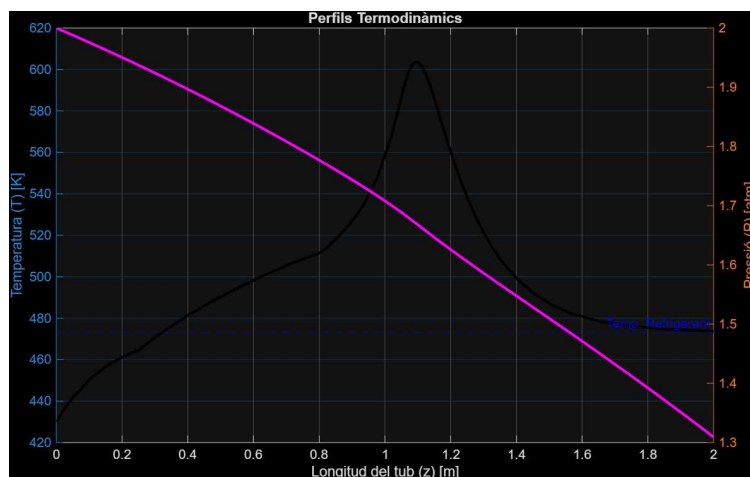


Figura 11.1. Evolució de la temperatura del fluid i refrigerant i evolució de la pressió al llarg del reactor.

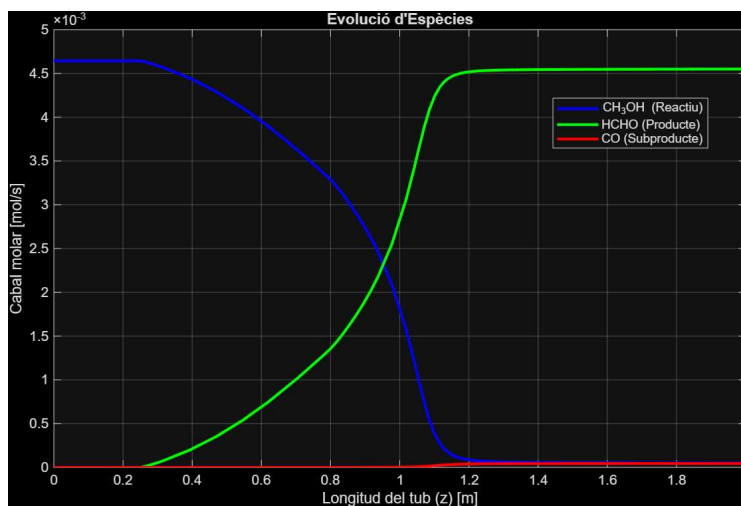


Figura 11.2. Evolució dels cabals molars de reactius i productes d'interès al llarg del reactor.

Taula 11.4. Resultats del reactor.

Paràmetre	Valor sortida per tub	Valor sortida reactor
Conversió metanol	98,94%	98,94%
Selectivitat cap a formaldehid	99,02%	99,02%
Cabal molar sortida HCHO [mol/s]	0,00455	45,5
Cabal molar CO [mol/s]	0,00004	0,4
Cabal molar sortida H ₂ O [mol/s]	0,00464	46,4
Cabal molar sortida MeOH [mol/s]	0,00005	0,5
Cabal molar sortida N ₂ [mol/s]	0,03929	392,9
Cabal molar sortida O ₂ [mol/s]	0,00812	81,2
Temperatura de sortida refrigerant [K]	473	473
Temperatura de sortida producte [K]	474	474
Pressió de sortida producte [atm]	1,31	1,31

11.2.9 Codi MATLAB 2

Codi utilitzat per la simulació del reactor amb oli tèrmic com a refrigerant.

```
function
simulacion_reactor_TFG_Completo_Un_Solo_Tubo_Con_inerte_Con_Tubo_Corto-Ta_Variable
()
% 1. CONDICIONS INICIALS I RESOLUCIÓ
% DADES DEL DISSENY DEL REACTOR
Dt = 0.02621; % [m]
Num_Tubs = 7000;
Long_Tub = 2; % [m]
z_span = [0 Long_Tub];
% CAUDAL INICIAL PER UN TUB
Fte_s_total = 32623.91/60; % [mol/s]
Fte_s_tub = Fte_s_total / Num_Tubs; % [mol/s]
y_m0 = 0.0854; % 8.54% Metanol
y_air = 1 - y_m0; % 91.46% Aire
y_O2_0 = y_air * 0.21;
% Caudals molars inicials F_i0 [mol/s]
F_CH3OH_0 = y_m0 * Fte_s_tub;
F_O2_0 = y_O2_0 * Fte_s_tub;
F_HCHO_0 = 0;
F_H2O_0 = 0;
F_CO_0 = 0;
P_0 = 2.5; % Presió inicial [atm]
T_0 = 480; % Temperatura inicial del gas [K]
% --- ITERACIÓ TEMPERATURA REFRIGERANT (CONTRACORRENT) ---
Ta_entrada_L = 455; % Temperatura d'entrada oli (z=1,5) [K]
Ta_sortida_z0 = 475; % Suposició de sortida
tolerancia = 0.1; % Volem un error inferior a 0,1
```

```

error_Ta = 100; % Primer posem un error alt perquè comenci el bucle
iter = 0;
while abs(error_Ta) > tolerancia && iter < 100
    iter = iter + 1;
    % Vector de valors inicials
    Y0 = [F_CH3OH_0; F_O2_0; F_HCHO_0; F_H2O_0; F_CO_0; P_0; T_0; Ta_sortida_z0];
    % RESOLUCIÓ EQUACIONS DIFERENCIALS
    [z, Y] = ode15s(@equacions_diferencials, z_span, Y0);
    % Comprovem la temperatura del refrigerant en arribar a z=1.5
    Ta_final_calculada = Y(end, 8);
    % Calculem l'error respecte la Ta_entrada_L
    error_Ta = Ta_final_calculada - Ta_entrada_L;
    % Serveix per calcular el següent valor a iterar tenint en compte
    % l'error anterior
    Ta_sortida_z0 = Ta_sortida_z0 - (error_Ta * 0.8);
    fprintf('L oli termic sortira del reactor a una temperatura de %.2f K (%.2f
    °C).\n\n', Ta_sortida_z0, Ta_sortida_z0 - 273.15)
end
% 2. EXTRACCIÓ I CàLCUL DE RESULTATS
F_CH3OH = Y(:, 1);
F_O2 = Y(:, 2);
F_HCHO = Y(:, 3);
F_H2O = Y(:, 4);
F_CO = Y(:, 5);
P = Y(:, 6);
T = Y(:, 7);
Ta = Y(:, 8);
Conversion = (F_CH3OH_0 - F_CH3OH) ./ F_CH3OH_0;
Selectividad = F_HCHO ./ (F_HCHO + F_CO);
U = 135; % [W/m2*K]
% Càlcul de calor alliberada
Q_extret_per_metre = U * pi * Dt * (T - Ta); % [W/m] per a un tub per metre
Q_un_tub = trapz(z, Q_extret_per_metre); % Integral al llarg de L [W]
Q_total_planta = Q_un_tub * Num_Tubs; % Calor total del reactor [W]
fprintf('Resultados a la salida del tubo (z = %d m):\n', Long_Tub);
fprintf('- Conversión de Metanol: %.2f %%\n', Conversion(end) * 100);
fprintf('- Selectividad hacia HCHO: %.2f %%\n', Selectividad(end) * 100);
fprintf('Caudal molar salida Metanol: %.7f \n', F_CH3OH(end) );
fprintf('Caudal molar salida Formaldehido: %.7f \n', F_HCHO(end) )
fprintf('Calor total planta: %.2f W\n', Q_total_planta)
% 3. GRAFICS
figure(1);
plot(z, F_CH3OH, 'b', z, F_HCHO, 'g', z, F_CO, 'r', 'LineWidth', 2);
xlabel('Longitud del tubo (z) [m]'); ylabel('Caudal molar [mol/s]');
legend('CH_3OH (Reactivo)', 'HCHO (Producto)', 'CO (Subproducto)', 'Location',
'best');
title('Evolución de Especies'); grid on;
figure (2)
yyaxis left
plot(z, T, '-k', 'LineWidth', 2);
hold on;

```

```

plot(z, Ta, '--b', 'LineWidth', 2);
hold off;
ylabel('Temperatura (T) [K]');
legend('T Gas', 'T Oli', 'Location', 'best');
% yyaxis right
% plot(z, P, '-m', 'LineWidth', 2);
% ylabel('Presión (P) [atm]');
% xlabel('Longitud del tubo (z) [m]');
title('Perfil Termodinàmic'); grid on;
end
% SUBFUNCIÓ D'EQUACIONS
function dYdz = equacions_diferencials(z, Y)
% 1. Definim les variables
F_CH3OH = Y(1);
F_O2 = Y(2);
F_HCHO = Y(3);
F_H2O = Y(4);
F_CO = Y(5);
P = Y(6);
T = Y(7);
Ta = Y(8);
% PARÀMETRES OPERATIUS FIXES
Num_Tubs = 7000;
Fte_s_inicial = 32623.91 / 60 / Num_Tubs;
y_m0 = 0.0854;
F_N2 = Fte_s_inicial * (1 - y_m0) * 0.79;
% PARÀMETRES TÈRMICS
dH_rxn1 = -156300; % [J/mol]
dH_rxn2 = -236000; % [J/mol]
U = 135; % [W/m2*K]
Densitat_llit = 1084; % [kg/m3]
Cp_gas = 35; % Capacitat calorífica mescla [J/mol*K]
% PARÀMETRES ERGUN
Dp = 0.004; % [m]
Porositat_llit = 0.40;
Visc_din_gas = 2.5e-5; % [Pa*s] (aprox. aire a 220°C)
M_avg = 0.0292; % Pes molecular mitjà de la mescla [kg/mol] (Majoritativament aire)
% GEOMETRÍA
Dt = 0.02621; % [m]
At = (pi * Dt^2) / 4;
% Càlcul de Presions ParcialS
Ft_actual = F_CH3OH + F_O2 + F_HCHO + F_H2O + F_CO + F_N2;
P_CH3OH = (F_CH3OH / Ft_actual) * P;
P_O2 = (F_O2 / Ft_actual) * P;
P_H2O = (F_H2O / Ft_actual) * P;
P_HCHO = (F_HCHO / Ft_actual) * P;
% CINÈTICA REACCIONS
R = 8.314;
ko_HCHO = 1.5e7; Ea_HCHO = 86000;
Ko_CH3OH = 2.6e-4; Ea_CH3OH = -56780;
Ko_O2 = 1.423e-5; Ea_O2 = -60320;

```

```

Ko_H2O = 5.5e-7; Ea_H2O = -86450;
K_HCHO = ko_HCHO * exp(-Ea_HCHO / (R * T));
K_CH3OH = Ko_CH3OH * exp(-Ea_CH3OH / (R * T));
K_O2 = Ko_O2 * exp(-Ea_O2 / (R * T));
K_H2O = Ko_H2O * exp(-Ea_H2O / (R * T));
Theta_CH3OH = (K_CH3OH * P_CH3OH) / (1 + K_CH3OH * P_CH3OH + K_H2O * P_H2O);
Theta_O2 = (K_O2 * P_O2^0.5) / (1 + K_O2 * P_O2^0.5);
r1 = K_HCHO * Theta_CH3OH * Theta_O2;
ko_CO = 3.5e2;
Ea_CO = 46000;
k_CO = ko_CO * exp(-Ea_CO / (R * T));
Theta_HCHO = P_HCHO / (1 + K_CH3OH * P_CH3OH + K_H2O * P_H2O);
r2 = k_CO * Theta_O2 * Theta_HCHO;
% COMPOSICIÒ LLIT
if z < 0.5
f_cat = 0.25; % De 0 a 0.38m: 25% actiu
elseif z < 1
f_cat = 0.4; % De 0.38m a 1m: 40% actiu
elseif z < 1.5
f_cat = 0.739; % De 0.810m a 1.5m: 75% actiu
% elseif z < 1.6
% f_cat=0.5;
else
f_cat=1;
end
% PARÀMETRES DE L'OLI TÈRMIC
Cp_ref = 2200; % Capacitat calorífica de l'oli [J/kg*K]
m_ref_planta = 170; % Cabal d'oli [kg/s]
m_ref_tub = m_ref_planta / Num_Tubs;
% Multiplicador per passar de dW a dz: dW = (rho_b * At * f_cat) * dz
factor_masa_activa = Densitat_llit * At * f_cat;
% 1. Balanç de Matèria (mol / s * m)
dF_CH3OH_dz = -r1 * factor_masa_activa;
dF_O2_dz = (-0.5 * r1 - 0.5 * r2) * factor_masa_activa;
dF_HCHO_dz = (r1 - r2) * factor_masa_activa;
dF_H2O_dz = (r1 + r2) * factor_masa_activa;
dF_CO_dz = r2 * factor_masa_activa;
% 2. Pèrdua de pressió
Densitat_gas = ((P * 101325) * M_avg) / (8.314 * T);
% Velocitat màssica superficial actual [kg/(m2*s)]
G = (Ft_actual * M_avg) / At;
% Pèrdua de càrrega en [Pa/m] segons Ergun
dPdZ_Pa = - (G / (Densitat_gas * Dp)) * ((1 - Porositat_llit) / Porositat_llit^3)
* ((150 * (1 - Porositat_llit) * Visc_din_gas / Dp) + 1.75 * G);
% 3. Balanç d'Energia
% Calor generat per reacció (W/m)
Q_generado_dz = (r1 * (-dH_rxn1) + r2 * (-dH_rxn2)) * factor_masa_activa;
% Calor extret per les parets metàl·liques (W/m)
Q_extraido_dz = U * pi * Dt * (T - Ta);
dTdz = (Q_generado_dz - Q_extraido_dz) / (Ft_actual * Cp_gas);
% Conversió a [atm/m] per integrarlo amb P

```

```

dPdZ = dPdZ_Pa / 101325;
% 4. Balanç d'energia (OLI EN CONTRACORRENT)
dTadZ = - Q_extraido_dz / (m_ref_tub * Cp_ref);
% Sortida del vector diferencial
dYdz = [dF_CH3OH_dz; dF_O2_dz; dF_HCHO_dz; dF_H2O_dz; dF_CO_dz; dPdZ; dTdZ; dTadZ];
end

```

11.2.10 Dimensionament de la carcassa

Un cop realitzada la parametrització de les característiques del reactor, es pot realitzar el disseny de la carcassa exterior.

Per fer-ho s'ha utilitzat la següent Equació 11.27.

$$D_b = D_E \cdot \left(\frac{N_t}{K_1}\right)^{\frac{1}{n_1}} \quad (27)$$

On:

N_t : Número de tubs

D_b : Diàmetre del feix de tubs [mm]

D_E : Diàmetre exterior dels tubs [mm]

n_1 i K_1 són funció el pitch escollit i el número de passos per tubs segons la Taula 11.5

Taula 11.5. Valors de K_1 i n_1 segons el tipus de pitch i passos per tubs.

Pitch triangular pt = 1.25 DE					
Passos per tub	1	2	4	6	8
K1	0,22152778	0,17291667	0,12152778	0,51597222	0,25347222
n1	2.142	2.207	2.285	2.499	2.675
Pitch quadrat pt = 1.25 DE					
Passos per tub	1	2	4	6	8
K1	0,14930556	0,10833333	0,10972222	0,27916667	0,22986111
n1	2.207	2.291	2.263	2.617	2.643

En el cas del reactor dissenyat, s'ha optat per implementar un pitch triangular amb un pas per tub.

D'aquesta manera, si es junten tots els valors nombrats anteriorment ens queda la següent expressió;

$$D_b = 31,75 \text{ mm} \cdot \left(\frac{10000}{0,22152778} \right)^{\frac{1}{2,142}} = 3988,5 \text{ mm}$$

Si tenim en compte un augment de 0,05 m de diàmetre respecte el feix de tubs fins la paret interior de la carcassa, ens queda un total de 4,038 m de diàmetre total interior.

Degut que el fluid refrigerant es tracta d'aigua en ebullició i no d'oli tèrmic, tant la carcassa com els tubs del reactor han d'estar preparats per suportar la pressió necessària per assolir el punt d'ebullició de l'aigua a la temperatura òptima.

Com s'ha comentat anteriorment, el refrigerant (aigua) es troba a una temperatura de 200°C, a la següent Taula 11.6 es mostren les diferents pressions i temperatures a les que podem trobar l'aigua saturada.

Taula 11.6 Pressions de saturació a diferents temperatures per aigua pura.

T (°C)	P (mmHg)
100	760
101	787,57
102	815,86
103	845,12
104	875,06
105	906,07
106	937,92
107	970,6
108	1004,42
109	1038,92
110	1074,56
111	1111,2
112	1148,74
113	1187,42
114	1227,25
115	1267,98
120	1489,14
125	1740,93
130	2026,1
135	2347,26
140	2710,92
145	3116,76
150	3570,48
175	6694,08
200	11659,16
225	19123,12
250	29817,84
275	44580,84

300	64432,8
-----	---------

S'observa doncs com per a una temperatura de 200°C correspon una pressió de 11659,16 mmHg, és a dir 15,54 bar.

Segons el codi ASME (Boiler and Pressure Vessel Code, Secció VIII, Divisió 1) l'equació a seguir per calcular l'espessor de la paret de la carcassa és la següent Equació 11.28.

$$e = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C_C \quad (28)$$

On:

e: Espessor mínim requerit per la carcassa [mm]

P: Pressió de disseny [MPa]

R: Radi intern de la carcassa del reactor [mm]

S: Tensió màxima admissible del material a la temperatura d'operació [MPa]

E: Eficiència de la unió soldada (normalment 0,85)

C_C: Tolerància per corrosió [mm]

Com s'ha comentat anteriorment, la pressió d'operació és de 15,54 bar, o el que és el mateix, 1,554 MPa, tot i així a aquesta pressió d'operació se l'ha de sumar un valor de seguretat, per tant es suposarà que la pressió de disseny té un valor de 1,8 MPa.

El radi intern de la carcassa té un valor de 2,019 m.

La tensió màxima admissible per l'acer al carboni (ASME SA-516 Grau 70) a 200°C té un valor de 138 MPa.

Finalment, queda conèixer el valor de la tolerància per corrosió. Segons els estàndard industrial de recipients a pressió i calderes (com ASME i TEMA), quan s'utilitza acer al carboni en serveis d'aigua y vapor, s'aplica un factor de tolerància per corrosió mínim de 3,175 mm.

Per tant quedaria una expressió semblant a la següent.

$$e = \frac{1,8 \cdot 2019}{138 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 1,8} + 3,175 = 34,44 \text{ mm}$$

S'arrodonirà aquest valor a 35 mm d'espessor.

Pel càlcul i dimensionament dels capçals superior i inferior del reactor s'ha seguit l'estàndard industrial de capçals el·líptics 2:1. En aquest cas, com aquest sí que es trobarà en contacte constant amb la mescla reactiva i productes, ha de ser fortament resistent a la corrosió, per tant s'ha optat per utilitzar acer inoxidable (AISI 316L).

Per calcular el gruix necessari en aquest component, s'ha utilitzat l'Equació 11.29 provinent del codi ASME VIII per capçals el·líptics.

$$e = \frac{P \cdot D}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_C \quad (29)$$

On:

e: Espessor mínim requerit per la carcassa [mm]

P: Pressió de disseny [MPa]

D: Diàmetre intern del capçal [mm]

S: Tensió màxima admissible del material a la temperatura d'operació [MPa]

E: Eficiència de la unió soldada (normalment 0,85)

C_C: Tolerància per corrosió [mm]

A diferència del càlcul anterior, aquest càlcul va dirigit al fluid que circula per l'interior dels tubs.

Per tant, afegint un cert marge de seguretat a la pressió d'operació a l'interior dels tubs, es marcarà 0,3 MPa la pressió de disseny (3 bars).

Respecte el diàmetre intern del capçal, aquest és el mateix que el de la carcassa, per tant té un valor de 4,038 m.

La tensió admissible per acer inoxidable AISI 316L a 250°C té un valor de 115 MPa.

Finalment la tolerància per corrosió pren un valor de 1,5 mm per seguretat ja que la mescla reactiva pot ser corrosiva.

Per tant s'obté una expressió com la següent:

$$e = \frac{0,3 \cdot 4038}{2 \cdot 115 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 0,3} + 1,5 = 7,698 \text{ mm}$$

Obtenint així un valor de gruix aproximat pels capçals superior i inferior de 0,008 m.

Pel que fa al dimensionament, industrialment s'acostuma a utilitzar la relació 2:1 pel disseny d'aquests capçals, per aquest motiu, degut que el reactor fa 4m aproximadament de diàmetre, els capçals tindran 2m d'alt.

Cabal de refrigeració

En el codi de Matlab mostrat anteriorment (amb refrigeració d'aigua), s'ha utilitzat la següent expressió per calcular el cabal total de calor a extreure del reactor (Equació 11.30).

$$Q_{\text{extret per metre}} \left(\frac{W}{m} \right) = U \cdot \pi \cdot D_t \cdot (T - T_a) \quad (30)$$

On:

U : Coeficient global de transferència de calor $\left[\frac{W}{m^2 \cdot K} \right]$

D_t : Diàmetre tub [m]

T : Temperatura al reactor [K]

T_a : Temperatura del refrigerant [K]

Un cop executat el codi, aquests ens dona un resultat de 6503567.84 W.

Per calcular el cabal d'aigua en ebullició a 200°C necessari per absorbir aquesta calor, s'utilitzarà la següent equació (Equació 11.31).

$$m = \frac{Q}{\Delta H_{vap}} \quad (31)$$

On:

m : Cabal màssic d'aigua $\left(\frac{kg}{s}\right)$

Q : Calor generat per la reacció [kW]

ΔH_{vap} : Calor latent de vaporització $\left[\frac{kJ}{kg}\right]$

El calor generat per la reacció com ja s'ha comentat té un valor de 6503567,84 W. El valor del calor latent de l'aigua a 200°C és de 2182,4 kJ/kg.

Per tant, s'obté un cabal d'aigua de 2,98 kg/s.

11.3 Columna d'absorció

11.3.1 Mòdul de Hatta

Per el càlcul del mòdul de Hatta s'ha utilitzat l'Ecuació 11.32.

$$\text{Mòdul de Hatta} = \frac{\sqrt{k \cdot D_{Al} \cdot C_{Bl}}}{k_{Al}} \quad (32)$$

On:

k : Constant cinètica de la reacció $\left[\frac{m^3}{kmol} \cdot s^{-1}\right]$

D_{Al} : Coeficient de difusivitat de HCHO en aigua $\left[\frac{m^2}{s}\right]$

C_{Bl} : Concentració d'aigua al líquid $\left[\frac{kmol}{m^3}\right]$

k_{Al} : Coeficient de transferència de matèria al líquid $\left[\frac{m}{s}\right]$

Pel càlcul de la constant cinètica de la reacció, s'ha utilitzat l'equació d'Arrhenius (Equació 11.32) amb els següents valors.

$$k_h = 2.04 \cdot 10^5 \cdot \exp\left(-\frac{2936}{T}\right) \quad (32)$$

On:

T: Temperatura de la mescla [K]

Suposarem que la mescla es troba a 70°C degut que es la temperatura a la que es troba el líquid ala part inferior de la primera columna ja que és on trobem la zona crítica.

Per tant $k_h = 39,2 \text{ s}^{-1}$

Bibliogràficament [b] s'ha trobat que el coeficient de difusivitat de HCHO en aigua té un valor de $1,81 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ a 25°C, degut que aquest càlcul del mòdul de Hatta és una estimació qualitativa més que quantitativa, és a dir que no és imprescindible trobar el valor exacte dels seus components sinó el seu ordre de magnitud, es prendrà aquest valor de difusivitat com a vàlid.

El valor de la concentració d'aigua al líquid no és necessària en aquest cas degut que prèviament s'ha calculat k_h , es a dir, la constant de pseudo-primer ordre, on aquesta concentració ja està inclosa.

Degut a la complexitat de càlcul del coeficient de transferència de matèria al líquid (ej. Onda et al., 1968) s'ha decidit agafar un valor típic d'aquest paràmetre com és $10 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$.

Finalment, si es realitza el càlcul del Mòdul de Hatta amb els valors esmentats anteriorment s'obté que:

$$Hatta = 2,66$$

11.3.2 Dimensionament de la columna

11.3.2.1 Dimensionament de la columna amb el mètode NUT HUT

Per fer el dimensionament de la columna s'ha utilitzat el mètode de NUT i HUT. NUT és el número d'unitats de transferència i HUT la alçada de la unitat de transferència. El seu producte ens dona l'alçada de la columna (Equació 11.32):

$$h [m] = NUT \cdot HUT \quad (32)$$

Les expressions per calcular el NUT i HUT son les següents (Equació 11.33 i Equació 11.34 respectivament):

$$NUT = \ln \left(\frac{Y_1}{Y_2} \right) + Y_1 - Y_2 \quad (33)$$

$$HUT = \frac{(G'/S)}{(k_{Ag} \cdot a \cdot P_T)} \quad (34)$$

On:

G' : Caudal molar d'inert al gas $\left[\frac{mol}{s} \right]$

S : Secció de la columna $[m^2]$

k_{Ag} : Coeficient de transferència de matèria del formaldehid al gas $\left[\frac{mol}{atm \cdot m^2 \cdot s} \right]$

a : Area de contacte interfacial per unitat de volum $[m^{-1}]$

P_T : Pressió d'operació $[atm]$

Començant pels paràmetres necessaris per calcular el HUT;

El caudal molar d'inert al gas té un valor de 496,86 mol/s

La secció de la columna es pot calcular mitjançant la següent Equació 11.35:

$$S = \pi \cdot \frac{D_i^2}{4} \quad (35)$$

On:

D_i : Diàmetre intern de la columna [m]

Segons la simulació realitzada al simulador Aspen Hysys (mostrada més endavant en aquest mateix capítol) la columna d'absorció està dividida en dos seccions, una part superior amb un diàmetre de 2,530 m i una part inferior amb un diàmetre de 3,369 m. Normalment per estimacions constructives s'utilitza el diàmetre major a la columna, en aquest cas 3,369 m.

Per tant operant mitjançant l'Equació 11.35 s'obté un valor per la secció de 8,914 m².

Per calcular el valor del coeficient de transferència de matèria existeixen diverses correlacions relacions (com pot ser la correlació empírica de Jozef Gerhardus Maria Winkelman) tot i així, com l'objectiu del càlcul de l'alçada de la columna és obtenir un valor aproximat per contrastar amb el valor obtingut al simulador, s'ha decidit utilitzar un valor típic bibliogràfic de 0,189 mol/(atm·m²·s)

Per columnes d'absorció de rebliment s'acostuma a utilitzar un valor de a de 100 m²/m³.

Com a pressió d'operació de la columna s'utilitzarà la pressió mitja a la columna, és a dir 1,14 atm.

Respecte el càlcul del NUT, el valor de Y s'obté mitjançant la següent Equació 11.36:

$$Y = y_A / (1 - y_A) \quad (36)$$

On y_A és la composició de formaldehid al gas.

Si s'extreuen les composicions molars dels corrents d'entrada i sortida de la columna:

Fracció molar formaldehid entrada (Corrent 23)=0,0818

Fracció molar formaldehid sortida (Corrent 26)=0,000369

Es calcula a continuació Y_1 i Y_2 :

$$Y_1 = \frac{0,0818}{1 - 0,0818} = 0,0891$$

$$Y_2 = \frac{0,000369}{1 - 0,000369} = 0,000369$$

Per tant tenint en compte tots els valors esmentats anteriorment ens quedaria la següent expressió (Equació 11.37):

$$h = \left(\ln \left(\frac{Y_1}{Y_2} \right) + Y_1 - Y_2 \right) * \left(\frac{\left(\frac{G'}{S} \right)}{(k_{Ag} \cdot a \cdot P_T)} \right) \quad (37)$$

On si es substitueixen tots els valors esmentats anteriorment s'obté:

$$h = 14,42 \text{ m}$$

Aquest valor servirà com a valor comparatiu o estimatiu pel dimensionament del simulador Hysys.

11.3.2.2 Dimensionament de la columna amb el simulador Aspen Hysys

Tot i que el mètode NUT HUT ens pot donar una idea de les dimensions de la nostra columna, es un mètode aproximatiu i s'ha utilitzat per verificar la informació obtinguda mitjançant el simulador Aspen Hysys. Per tant, per realitzar el disseny estricte i definitiu s'ha utilitzat aquest simulador, especificant totes les característiques desitjades i canviant certs paràmetres clau per assegurar que l'equip és realista i compleix amb les necessitats del projecte.

A continuació es mostra el procés realitzat amb el simulador per obtenir el dimensionament final de la columna.

Per començar amb el dimensionament de la columna d'absorció, es farà click sobre la icona de la torre al Spreadsheet de la simulació de hysys. Apareixerà una nova finestra com la que es mostra a la Figura 11.3.

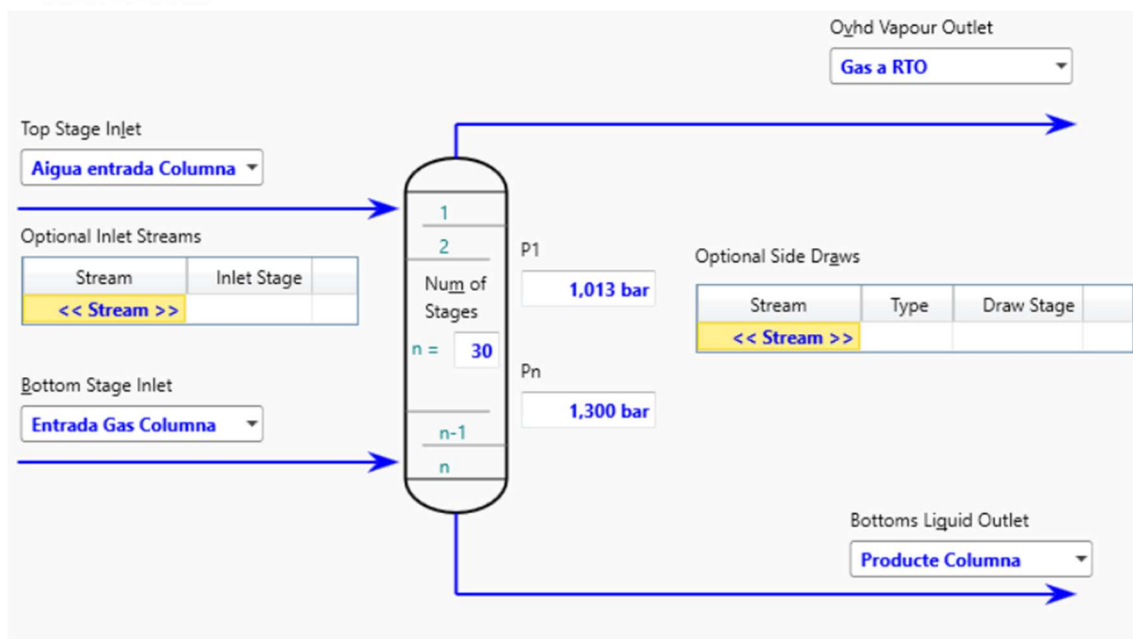


Figura 11.3. Finestra inicial columna d'absorció.

En aquesta finestra, es connectaran els corrents que entraran o sortiran de la columna per caps i per cues. En fase líquida entrarà aigua líquida per la part superior anomenada "Top Stage Inlet". En fase gas entraran els productes del reactor a tractar, a la secció anomenada "Bottom Stage Inlet". També s'han de definir els corrents de sortida gas i líquida, "Ovhd Vapour Outlet" i "Bottoms Liquid Outlet" respectivament. En aquesta finestra també es podrà definir (amb una suposició inicial) el nombre d'etapes i pressió d'operació de la columna. En el cas de FormalAir, després de realitzar diverses iteracions, es va trobar que el valor òptim per aquests paràmetres era de 30 etapes (teòriques ja que és una columna de rebliment) i 1,3 bar a cues i 1,013 bar a caps.

Com s'ha comentat anteriorment, la reacció d'absorció del formaldehid en aigua és exotèrmica i per tant és necessari l'implementació d'un "Pump Around" per baixar la temperatura d'operació de la columna i així augmentar l'eficiència de la mateixa. Per incloure aquest accessori, s'ha d'entrar a la pestanya "Monitor" dins de l'apartat "Design" en el que ja s'era anteriorment. Al entrar a aquesta nova pestanya es troba una pantalla com la mostrada a la Figura 11.4.

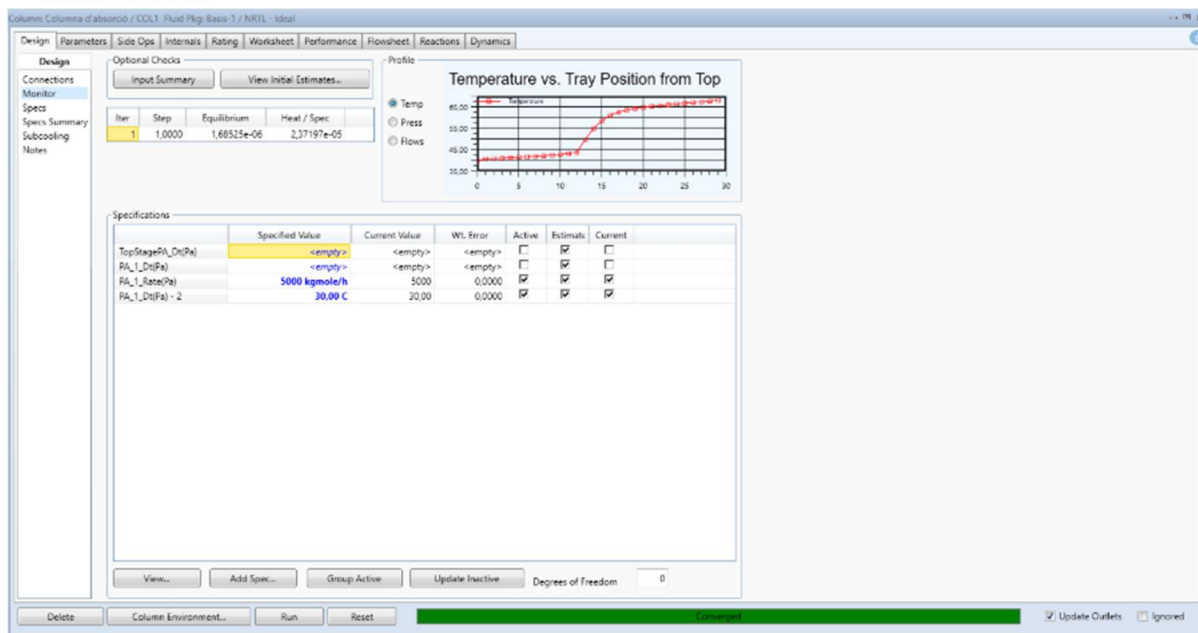


Figura 11.4. Pestanya "Monitor" per una columna d'absorció a HYSYS.

Aquí es pot afegir mitjançant el botó "Add Spec" les característiques del Pump Around, tant el cabal de recirculació com el salt tèrmic desitjat. En el cas de FormalAir, després de realitzar diverses iteracions, simulacions i proves, s'ha trobat que els valors òptims per aquests és un cabal de recirculació de 5000 kmol/h amb un salt tèrmic (refredament) de 30°C.

A continuació s'ha d'especificar on es vol que agafi el líquid aquest Pump Around i on volem que el torni a introduir, aquestes especificacions es poden fer dins la pestanya "Side Ops" a l'apartat "Pump Arounds". Al fer click s'obrirà una pestanya com la mostrada a la Figura 11.5.

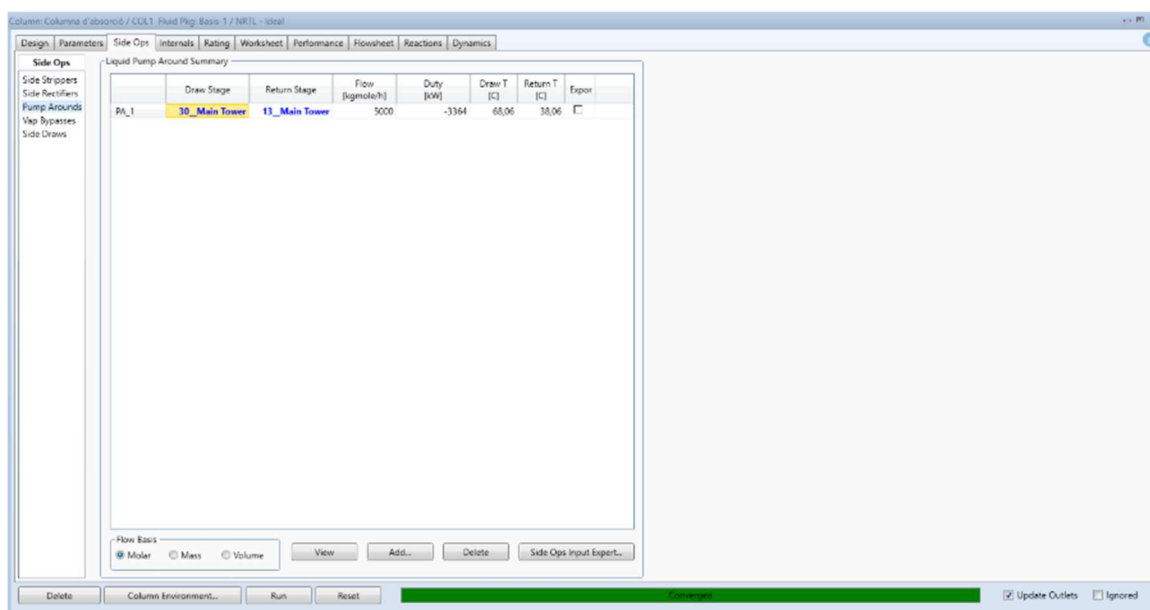


Figura 11.5. Pestanya d'especificacions del Pump Around.

A l'apartat "Draw Stage" s'especificarà l'etapa (recordar que son etapes teòriques ja que és una columna d'absorció amb rebliment, no plats) d'on es desitja extreure el líquid, en aquest cas del fons de la columna, l'etapa 30. A l'apartat "Return Stage" s'especificarà l'etapa on es desitja introduir el líquid de nou, en aquest cas a l'etapa 15.

Fins aquí el simulador HYSYS segueix realitzant els càlculs com si fos una columna d'absorció amb plats, ja que és la que porta predeterminada. Per canviar-la a una columna de rebliment, s'haurà d'entrar a la pestanya anomenada "Internals", que ens mostrarà una pantalla com la Figura 11.6.

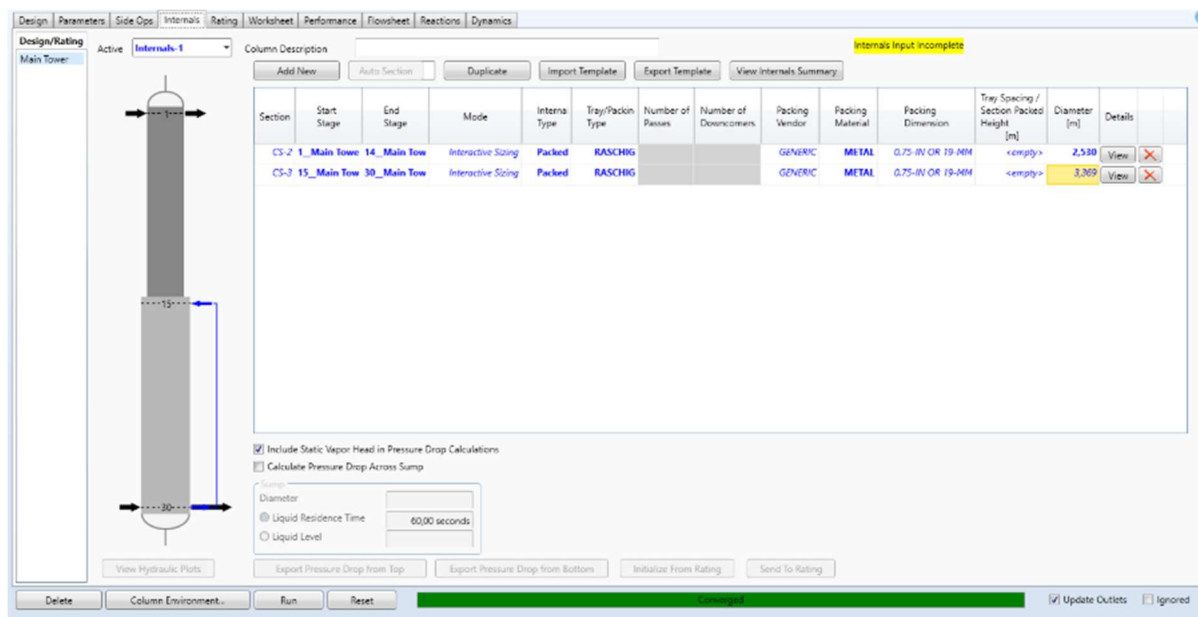


Figura 11.6. Pestanya "Internals" per una columna d'absorció.

En l'apartat anomenat "Internals Type" es podrà seleccionar l'opció de "Packed" (empacada) i a les columnes consecutives "Packing Type" i "Packing Material" es podrà especificar el tipus de rebliment que es desitja implementar així com el material d'aquest.

En el cas de FormalAir, s'ha optat per utilitzar el tipus d'empacament Rasching metàl·lics degut al seu ús tan comú a la indústria del formaldehid.

Finalment, si es desitja consultar altres paràmetres de disseny de la columna així com veure la distància entre etapes teòriques (fonamental per calcular l'alçada de la mateixa), s'ha d'entrar a la finestra "Rating" a l'apartat "Tower". On apareixerà l'informació de la manera que s'observa a la Figura 11.7.

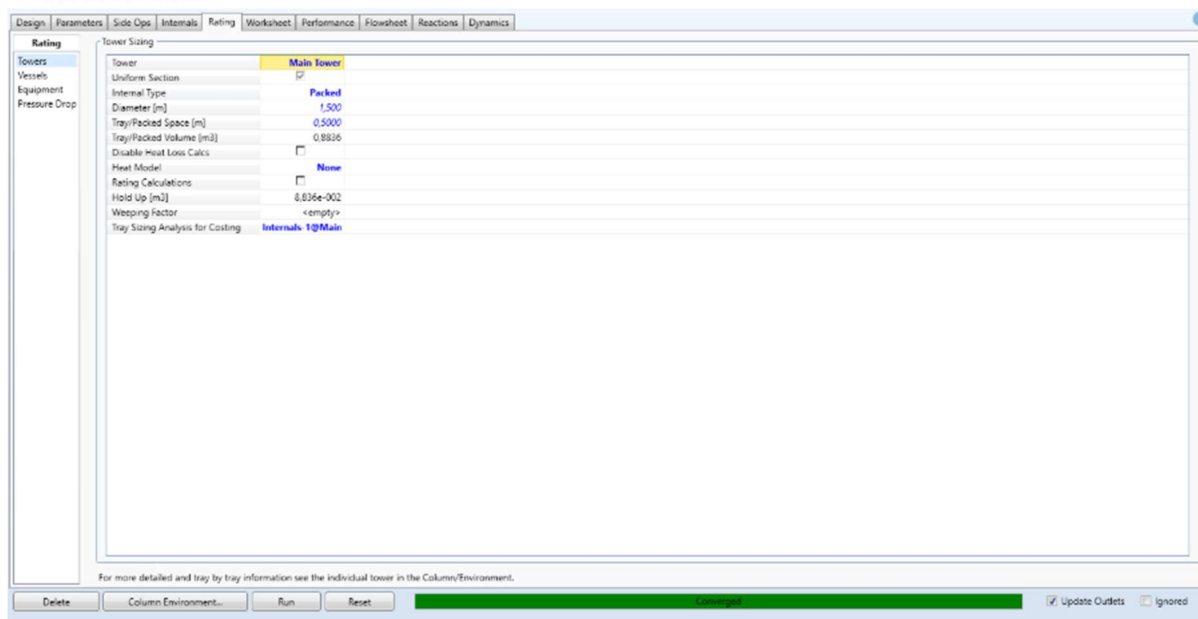


Figura 11.7. Finestra "Internals" per una columna d'absorció.

D'aquesta manera s'acaba el disseny de la columna d'absorció mitjançant el simulador Aspen Hysys.

11.3.2.3 Dimensionament accessoris columna.

11.4.2.3.1 Part inferior de la columna.

Es començarà dissenyant la base de la columna, aquesta tindrà la funció d'actuar com un tanc de reserva per que la bomba de fons no aspiri aire (evitant cavitacions i garantitzant l'NPSH).

Primer es calcularà el volum de líquid de reserva mitjançant l'Equació 11.38.

$$V_{liq} = Q_L \cdot t_{res} \quad (38)$$

On:

V_{liq} : Volum de líquid acumulat (m^3)

Q_L : Cabal volumètric del líquid que surt pel fons ($\frac{m^3}{min}$)

t_{res} : Temps de residència (min)

El cabal volumètric del líquid és l'equivalent al cabal volumètric del corrent 27 i té un valor de 13,97 m³/h.

El temps de residència varia en funció de les necessitats de la columna, en un procés on existeix un risc elevat que la columna quedi seca s'acostuma a utilitzar un valor de 5 min pel temps de residència, en el cas de la columna utilitzada a FormalAir, aquest risc és molt improbable ja que les temperatures de treball son relativament baixes (no existeix risc d'evaporació) i es treballa amb un cabal de líquid elevat (13,97 m³/h) per tant, s'ha decidit implementar un temps de residència de 3 min.

Per tant si es substitueixen les dades esmentades a l'equació anterior, s'obté un valor de 0,6985 m³.

A continuació, es calcularà l'alçada del líquid mitjançant l'Equació 11.39.

$$h_{liq} = \frac{4 \cdot V_{liq}}{\pi \cdot D_i^2} \quad (39)$$

On:

h_{liq} : Alçada del líquid (m)

D_i : Diàmetre intern de la columna (m)

Segons les especificacions esmentades a l'apartat anterior (dimensionament de la columna mitjançant Hysys) el diàmetre inferior intern de la columna té un valor de 3,369 m.

Si es substitueixen totes les dades a l'Equació 11.39 s'obté un valor d'alçada del líquid de 0,078 m.

Per calcular l'altura total de la base s'han de sumar les alçades dels factors que l'afecten, l'alçada del líquid, l'alçada de la canonada d'entrada de gas i un marge de seguretat. Tot seguint l'Equació 11.40.

$$H_{base} = h_{liq} + h_{entrada\ gas} + 0,5 \quad (40)$$

L'alçada que aporta la canonada de gas d'entrada té un valor de 0,8363 m

Sumant-ho tot s'obté un valor de 1,41 m per l'alçada de la base.

11.3.2.3.2 Part superior de la columna i alçada total.

A continuació, es realitzarà el dimensionament de la part superior de la columna.

Aquesta surt de la suma dels següents factors (Equació 11.41).

$$H_{top} = h_{distribuidor} + h_{espai} + h_{demister} + h_{sortida} \quad (41)$$

Respecte el distribuïdor, acostumen a tenir una alçada d'uns 0,3 a 0,5 m, en el cas de FormalAir, s'ha decidit utilitzar un distribuïdor de 0,3m d'alçada.

L'alçada d'espai fa referència a la distància mínima obligatòria entre el distribuïdor del líquid i l'eliminador de gotes (demister). Si es col·loca més a prop, el gas esquitxaria aigua directament al filtre i el saturaria. En el cas de FormalAir, s'ha decidit implementar un espai de 0,5m.

L'eliminador de gotes o demister escollit té una alçada de 0,15m, simplement es tracta d'una malla metàl·lica on les petites gotes de líquid queden retingudes i cauen de nou a la columna.

Finalment, l'espai reservat per la canonada de sortida de gas que és de 0,812 m.

Realitzant la suma de tots els factors esmentats anteriorment, s'obté una alçada total de la part superior de 1,762m.

A més, s'ha de tenir en compte que de manera natural, el líquid que circula a través de la columna tendeix a anar cap a les parets, per aquest motiu, es necessària la incorporació d'un distribuïdor de líquid en un punt mig de la columna, aquest ocuparà aproximadament 0,25m.

Sumant tots els components (superiors, inferiors i intermitjos) més l'alçada de rebliment calculada mitjançant el simulador Hysys, s'obté que la columna d'absorció TA-401 té una alçada total de 18,42 m.

11.3.2.3.3 Altres paràmetres de disseny

A continuació s'ha calculat el gruix de la paret del cos cilíndric de la columna. És important esmentar que la columna comptarà amb dos gruixos diferents a la columna, diferenciats segons el diàmetre que tingui aquesta en el punt estudiat.

L'equació utilitzada per realitzar aquest càlcul és la següent (Equació 11.42).

$$t_c = \frac{P \cdot r_i}{E_s \cdot E - 0,6 \cdot P} + CA \quad (42)$$

On:

t_c : gruix de la paret de la columna [m]

P : pressió de disseny [Pa]

r_i : radi interior de la columna [m]

E_s : esforç tallant de l'acer inoxidable [Pa]

E : eficiència de la junta

CA : marge de corrosió [m]

La pressió de disseny utilitzada per realitzar aquest càlcul, serà la màxima pressió d'operació a la columna, que té un valor de 1,3 bar.

Respecte el diàmetre interior de la columna, com s'ha comentat anteriorment, es divideix en dos seccions, una superior de 2,55 m i una inferior de 3,369 m.

L'esforç tallant de l'acer inoxidable (316 L) té un valor de 1068,32 atm.

L'eficiència de la junta o factor d'eficiència de la soldadura té un valor típic de 0,85.

Finalment el marge de corrosió s'ha determinat amb un valor de 1,5 mm.

Si es substitueixen tots els valors esmentats anteriorment a l'Equació 11.42. S'obtenen els següents resultats (Taula 11.7).

Taula 11.7. Gruix de la paret de la columna d'absorció en funció de la secció segons Codi ASME.

Secció de la columna	Gruix de la paret (m)
Superior (2,55m)	0,003303
Inferior (3,369m)	0,003882

Com es pot observar, el gruix calculat per la columna son extremadament petits i només fan referència al gruix mínim que ha de tenir la columna d'absorció segons el Codi ASME Secció VIII Div 1. Tot i així, s'han de tenir en compte altres càrregues externes com el vent o possibles sismes i el pes propi de l'equip, que suposarà una gran càrrega al tractar-se d'un equip d'unes dimensions tan elevades.

Per aquest motiu, FormalAir ha decidit utilitzar un gruix de paret de 12 mm en la secció inferior de la columna i 10 mm en la secció superior.

Taula 11.8. Gruix final de la paret de la columna d'absorció en funció de la secció.

Secció de la columna	Gruix de la paret (m)
Superior (2,55m)	0,010
Inferior (3,369m)	0,012

Finalment s'ha determinat el pes de la columna buida i plena d'aigua.

Una columna d'absorció es pot dividir en tres seccions diferenciades, els capçals i el cos cilíndric principal.

Per calcular el colom de la part cilíndrica de la columna s'ha utilitzat l'Equació 11.43.

$$V_c = \frac{\pi \cdot h_c}{4} \cdot (D_e^2 - D_o^2) \quad (43)$$

On:

V_c : volum part cilíndrica de la columna (m^3)

h_c : alçada de la part cilíndrica de la columna (m)

D_e : diàmetre extern de la columna (m)

D_o : diàmetre intern de la columna (m)

L'alçada tant de la secció superior com inferior de la columna té un valor de 7,5 m.

A la taula següent es mostren els diàmetres corresponents per a cada secció de la columna (Taula 11.9).

Taula 11.9. Diàmetre intern i extern de la columna en funció de la secció.

Secció de la columna	Diàmetre intern (m)	Diàmetre extern (m)
Superior	2,55	2,57
Inferior	3,369	3,389

Si s'operen els valors esmentats anteriorment i es sumen els valors de volum obtinguts a cadascuna de les seccions s'obté la següent expressió i resultat:

$$V_{total} = V_{superior} + V_{inferior} = 0,603 + 0,796 = 1,399 m^3$$

Per la zona dels capçals superiors i inferiors, és difícil realitzar un càlcul exacte ja que aquests no són un simple cilindre d'acer sinó que tenen components intens que compliquen la seva geometria com poden ser de demister, distribuïdor de líquid entre d'altres. Per aquest motiu s'ha decidit suposar un pes general per tots aquests components de 3000 kg per la base de la columna i 2000 kg per la part superior.

Si es multiplica el volum total d'acer 316L del cos de la columna i es sumen els pesos de la part superior i inferior de la columna:

$$Pes\ total\ columna = 1,399 \cdot 8000 + 3000 + 2000 = 16192\ kg$$

El pes dels anells representen una càrrega important a la columna, aquest es pot calcular de la següent manera (Equació 11.44):

$$Pes\ rebliment\ (kg) = V_{total} \cdot \rho_{aparent} \quad (44)$$

On:

V_{total} : volum total intern de la secció a estudiar [m^3]

$\rho_{aparent}$: densitat aparent del rebliment [$\frac{kg}{m^3}$]

Recordar que el rebliment escollit han sigut anells Rasching de 19 mm. Aquests, aplicant una porositat de 0,9, tenen una densitat aparent de 600 kg/m³.

Per calcular el volum total intern de la columna s'ha seguit l'Equació 11.45.

$$Volum\ intern\ total\ columna\ [m^3] = V_{secció\ superior} + V_{secció\ inferior} \quad (45)$$

Els volums de les dues seccions es calcularan respectivament amb l'Equació 11.46.

$$V_{secció} = \frac{\pi \cdot D_{secció}^2}{4} \cdot h_{secció} \quad (46)$$

On:

$V_{secció}$: volum total intern de la secció [m^3]

$D_{secció}$: diàmetre intern de la secció [m]

$h_{secció}$: alçada de la secció [m]

Els resultats d'aquest càlcul es mostren a la Taula 11.10.

Taula 11.10. Resultats del dimensionament de la columna d'absorció.

Secció	Diàmetre [m]	Alçada [m]	Volum [m3]
Superior	2,55	7,5	38,3
Inferior	3,369	7,5	66,86
TOTAL	-	-	105,16

Per tant si es realitza el producte entre el volum intern total de la columna per la densitat aparent del rebliment, s'obté un valor de pes del rebliment total de 63,096 tn.

Per calcular el pes de l'equip ple d'aigua, cal saber quin es el volum d'espais buits a l'interior de la columna, per fer-ho, es pot realitzar directament la següent operació (Equació 11.47):

$$Volum\ espais\ buits\ columna = \frac{Volum\ ocupat\ per\ rebliment}{0,1} \quad (47)$$

Substituint les dades queda:

$$Volum\ espais\ buits\ columna = \frac{105,16}{0,1} = 1051,6\ m^3$$

Multiplicant per la densitat de l'aigua s'obté que el pes que cal afegir a la columna quan esta plena d'aigua es de 1051,6 tn.

11.4 Canonades

11.4.1 Dimensionament de les canonades

Es important remarcar que els càlculs realitzats en els següents apartats son amb els valors de la canonada DN125-MOH-AI-100-01, que correspon a la canonada numero 1. Fins que no s'esmenti, les dades son extretes d'aquest tram.

Per dimensionar les canonades, i poder obtenir el diàmetre cada canonada, així com la velocitat del fluid que circula al seu interior, primer es necessari obtenir el diàmetre. (Equació 11.48).

$$D_{ext} = \sqrt{\frac{4 \cdot Q}{\pi \cdot v_{sup}}} \quad (48)$$

On:

D_{ext} : Diàmetre extern calculat teòricament [m]

Q : Caudal volumètric $\left[\frac{m^3}{s}\right]$

v_{sup} : Velocitat de disseny suposada $\left[\frac{m}{s}\right]$

Inicialment s'escull una velocitat típica de circulació de línia de procés, escollida segons la *Taula 4.2* del *Capítol 4: Canonades, vàlvules, bombes i accessoris*, i es calcula el diàmetre extern suposat. (Equació 11.48.)

$$D = \sqrt{\frac{4 \cdot 90 \frac{m^3}{h} \cdot \frac{1h}{3600 s}}{\pi \cdot 2 m/s}} = 0,126 m$$

A partir del diàmetre nominal (DN) comercial més proper al D_{ext} , obtingut en la *Taula 4.3*, del *Capítol 4: Canonades, vàlvules, bombes i accessoris*, es recalcula la velocitat real (Equació 11.49):

$$v = \frac{4 \cdot Q}{\pi \cdot D_{ext}^2} \quad (49)$$

On:

v : Velocitat real del fluid en la conducció (m/s).

D_{ext} : Diàmetre extern normalitzat de la canonada (m).

Q : Caudal volumètric $\left[\frac{m^3}{s} \right]$

Una vegada es calcula el diàmetre extern seguint la velocitat típica de circulació, s'escull un diàmetre superior, seguint la *Taula 4.3 del Capítol 4: Canonades, vàlvules, bombes i accessoris*. Una vegada es selecciona el DN correcte, es procedeix a calcular la velocitat de circulació correcte.

$$v = \frac{4 \cdot 90 \frac{m^3}{h} \cdot \frac{1h}{3600s}}{\pi \cdot 0,141^2 m} = 1,59 m/s$$

11.4.2 Pèrdues de carrega en canonades amb fluids incompressibles

Per poder calcular les pèrdues de carrega en canonades on circulen líquids, primer es necessari calcular el Reynolds (Equació 11.50):

$$Re = \frac{\rho \cdot v \cdot D_{ext}}{\mu} \quad (50)$$

On:

Re : Nombre de Reynolds (a dimensional).

μ : Viscositat dinàmica del fluid ($Kg/(m \cdot s)$)

ρ : densitat ($\frac{kg}{m^3}$)

D_{ext} : Diàmetre extern normalitzat de la canonada (m)

v : Velocitat real del fluid en la conducció (m/s).

Per poder calcular les pèrdues de carrega en canonades amb líquids, primer es calcula el Reynolds del fluid, amb l'equació 11.50.

$$Re = \frac{786 \frac{kg}{m^3} \cdot 0,141 m \cdot 1,59 m/s}{5,45 \cdot 10^{-4} \frac{kg}{m \cdot s}} = 325067,19$$

Seguidament, es calcula el paràmetre $4f$, necessari per a calcular les pèrdues de pressió segons l'equació de Swamee-Jain (Equació 11.51).

$$4f = \frac{0,25}{\left[\log_{10} \left(\frac{\varepsilon/D_{ext}}{3,7} + \frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right]^2} \quad (51)$$

On:

$4f$: Factor de fricció de Darcy – Weisbach. (adimensional)

ε/D_{ext} : Rugositat relativa del conducte

Una vegada calculat el Reynolds, es procedeix al càlcul del factor $4f$.

$$4f = \frac{1}{\left[\log \left(\frac{1}{3,7 \left(\frac{0,141 m}{4,6 \cdot 10^{-5} m} \right)} + \frac{5,74}{325067,19^{0,9}} \right) \right]^2} = 0,0171$$

A partir de totes les dades anteriors es calculen les pèrdues de càrrega totals com la suma de les pèrdues en trams rectes i per accessoris. Les formules d'ambdós termes són (Equació 11.52) i (Equació 11.53):

$$e_{v,recta} = 4f \cdot \left(\frac{L}{D_{ext}} \right) \cdot \frac{v^2}{2} \quad (52)$$

On:

$4f$: Factor de fricció de Darcy – Weisbach. (adimensional)

$e_{v,recta}$: Pèrdua de càrrega per trams rectes $\left(\frac{m^2}{s^2} \right)$.

L : Longitud lineal del tram de canonada (m).

D_{ext} : Diàmetre extern normalitzat de la canonada (m)

v : Velocitat real del fluid en la conducció (m/s).

Després de calcular el factor $4f$, es poden calcular les pèrdues per fricció en una canonada recta seguint l'equació 11.52.

$$(e_v)_{recta} = 0,0171 \cdot \frac{1,59^2 \text{ m/s}}{2} \cdot \frac{12 \text{ m}}{0,141 \text{ m}} = 1,85 \text{ m}^2/\text{s}^2$$

Per altra banda, també es necessari calcular les pèrdues per fricció generades per els accidents (Equació 11.53)

$$e_{v,accident} = K \cdot \frac{v^2}{2} \quad \text{o bé} \quad e_{v,accident} = 4f \cdot \left(\frac{L_e}{D} \right) \cdot \frac{v^2}{2} \quad (53)$$

On:

$4f$: Factor de fricció de Darcy – Weisbach.

$e_{v,accident}$: Pèrdua de càrrega accidental o singular $\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$.

K : Coeficient de resistència localitzat

L_e/D : Relació de longitud equivalent de l'accessori obtinguda de taules comercials.

D : Diàmetre extern normalitzat de la canonada (m)

v : Velocitat real del fluid en la conducció (m/s).

Els valors de la relació de longitud equivalent per a cada accessori s'obté de la Taula 11.11

Taula 11.11 Valors de la relació de longitud equivalent

ACCESSORI	LONGITUD EQUIVALENT EN DIÀMETRES DE CONDUCCIÓ (L/D)
Vàlvula de globus oberta	340
Vàlvula d'angle oberta	150
Vàlvula de comporta oberta 100%	8
Vàlvula de comporta oberta 3/4	35
Vàlvula de comporta oberta 1/2	160
Vàlvula de comporta oberta 1/4	900
Vàlvula de verificació tipus giratori	100
Vàlvula de verificació tipus bola	150
Vàlvula de papallona oberta	45
Colze estàndard de 90°	30
Colze amb curvatura de 90°	20
Colze de "carrer" de 90°	50
Colze estàndard de 45°	16
Colze de "carrer" de 45°	26
Colze de 180°	50
Te estàndard, flux línia principal	20
Te estàndard, flux per branca	60

$$(e_v)_{accident} = 0,0171 \cdot \frac{1,59^2 \text{ m/s}}{2} \cdot 150 = 2,90 \frac{m^2}{s^2}$$

La pèrdua mecànica total del tram és la suma dels dos termes.

$$e_{v,total} = e_{v,recte} + \Sigma e_{v,accidents}$$

On:

$e_{v,total}$: Pèrdua de càrrega total $\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$.

$e_{v,recta}$: Pèrdua de càrrega per trams rectes $\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$.

$e_{v,accident}$: Pèrdua de càrrega accidental o singular $\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$.

En el cas de la canonada 1, aquesta té una vàlvula de verificació tipus bola, una vàlvula d'angle obert, i un colze estàndard de 90°. S'han de calcular les pèrdues per fricció per a cada accessori, i finalment fer el sumatori de tots.

$$e_{v,total} = 1,85 \frac{m^2}{s^2} + 2,90 \frac{m^2}{s^2} + 2,90 \frac{m^2}{s^2} + 0,58 \frac{m^2}{s^2} = 8,22 \frac{m^2}{s^2}$$

La caiguda de pressió Total es calcula a partir del balanç d'energia mecànica (Equació 11.54):

$$\frac{\Delta P}{\rho} + g \cdot \Delta z + \frac{1}{2} \cdot \frac{v^2}{\alpha} = w - e_{v,total} \quad (54)$$

On:

ΔP : Caiguda de pressió neta en el tram (Pa).

g : acceleració de la gravetat $\left(\frac{m}{s^2}\right)$

Δz : diferència d'alçada (m)

v : velocitat del fluid $\left(\frac{m}{s}\right)$

α : factor de correcció de l'energia cinètica

w : treball net $\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$

ρ : densitat $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$

$e_{v,total}$: Pèrdua de càrrega total $\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$.

Una vegada es calculen les pèrdues per accidents i per trams rectes, finalment es pot calcular la pèrdua de càrrega del tram del procés amb el balanç d'energia mecànica. (Equació 11.54)

$$\frac{\Delta P}{786 \frac{kg}{m^3}} + 9,81 \frac{m}{s^2} \cdot (0 m - 0 m) + \frac{1,59^2 \frac{m}{s}}{2 \cdot 1} = 0 - 8,22 m^2/s^2$$

Si resollem l'equació anterior, obtenim un resultat de $-7457,91 \frac{kg}{m \cdot s^2}$, unitats que equivalen a Pascals

11.4.3 Pèrdues de càrrega en canonades amb fluids compressibles

Es important remarcar que els càlculs realitzats en els següents apartats son amb els valors de la canonada DN450-AIR-AI-100-01, que correspon a la canonada numero 11. Fins que no s'esmenti, les dades son extretes d'aquest tram.

Respecte a les pèrdua de càrrega en canonades per on circulen fluids compressibles, hi ha algunes diferències de càlcul. Aquestes es calculen partint de l'equació de flux adiabàtic compressible. (Equació 11.55).

$$\left[\left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right) + \frac{P_1 \cdot \rho_1}{G^2} \right] \left[1 - \left(\frac{\rho_2}{\rho_1} \right)^2 \right] - \frac{\gamma-1}{\gamma} \ln \frac{\rho_1}{\rho_2} - 4f \frac{L}{D} = 0 \quad (55)$$

On:

γ : coeficient d'expansió adiabatica (1,4 per gasos monoatòmics o 1,7 gasos diatòmics)

G : flux massic $\left(\frac{kg}{m^2 \cdot s}\right)$

ρ_2 : Densitat en el punt final de la canonada (kg/m^3)

ρ_1 : Densitat en el punt inicial de la canonada (kg/m^3)

P_1 : Pressió en el punt inicial de la canonada (Pa)

P_2 : Pressió en el punt final de la canonada (Pa)

$4f$: Factor de fricció de Darcy – Weisbach.

L : Longitud lineal del tram de canonada (m).

Al ser un gas diatòmic, el valor del coeficient d'expansió adiabàtic aval 1,4

$$\left[\left(\frac{1,4 - 1}{1,4} \right) + \frac{210200 \text{ Pa} \cdot 1,874 \text{ kg/m}^3}{43,76^2 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}} \right] \left[1 - \left(\frac{\rho_2}{1,874 \text{ kg/m}^3} \right)^2 \right] - \frac{1,4 - 1}{1,4} \ln \frac{1,874 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}}{\rho_2} - 0,0137 \frac{46,13 \text{ m}}{0,457 \text{ m}} = 0$$

Utilitzant l'eina solver, podem obtenir el valor de la densitat en el punt 2, que equival a 1,868 kg/m³.

L'equació anterior permet trobar la densitat en el punt 2 d'una canonada, i per poder resoldre-la, es necessari d'una eina tipus solver, que resolgui directament l'equació, minimitzant l'error.

Una vegada es troba el valor de la densitat en el punt dos, s'utilitza l'equació de procés isentròpic d'un gas ideal (Equació 11.56), que permet relacionar la variació de la pressió i la densitat segons el comportament d'un gas.

$$\frac{P_2}{P_1} = \left(\frac{\rho_2}{\rho_1} \right)^\gamma \quad (56)$$

On:

P_2 : Pressió en el punt final de la canonada (Pa)

P_1 : Pressió en el punt inicial de la canonada (Pa)

ρ_2 : Densitat en el punt final de la canonada (kg/m³)

ρ_1 : Densitat en el punt inicial de la canonada (kg/m³)

γ : coeficient d'expansió adiabàtica (1,4 per gasos monoatòmics o 1,7 gasos diatòmics)

Una vegada calculat el valor de la pressió en el punt dos, les pèrdues de carrega en la canonada es calculen com la diferencia de pressions entre el punt 1 i 2.

Una vegada s'obté el valor de la densitat en el punt 2, resolent la incògnita P_2 es pot determinar la pressió en el punt 2.

$$\frac{P_2}{210200 \text{ Pa}} = \left(\frac{1,868 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}}{1,874 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} \right)^{1,4} = 209208,78 \text{ Pa}$$

Les pèrdues de carrega es calculen com la diferencia de pressió en el punt 2 i el punt 1.

$$\Delta P = 209208,78 \text{ Pa} - 210200 \text{ Pa} = -991,22 \text{ Pa}$$

11.4.4 Accidents en canonades amb fluid compressibles

Per poder tenir en compte els accidents en les canonades on es transporten gasos, es farà ús del mètode de longitud equivalent, seguint la Taula 11.11

Mitjançant el diàmetre, es calcularà la longitud equivalent de la canonada amb l'accident. La longitud total de la canonada, tenint en compte l'accident, es calcula amb l'equació 11.57

$$L_{total} = L_{recta} + \Sigma L_{equivalent} \quad (57)$$

On:

L_{total} : Longitud total de la canonada (m)

L_{recta} : Longitud recta de la canonada (m)

$L_{equivalent}$: Longitud equivalent de la canonada (m)

La longitud total servirà per poder calcular les pèrdues de carrega de les canonades amb gasos, tenint en compte els possibles accidents que es troben en aquestes.

$$45 \cdot 0,457 \text{ m} = L_e = 20,56 \text{ m}$$

La canonada numero 2 te dues vàlvules de papallona, per tant, s'han de tenir en compte el numero i tipus de accessoris de cada canonada.

La longitud equivalent de la canonada 11 es la següent:

$$L_{total} = 5 \text{ m} + 20,25 \text{ m} \cdot 2 = 46,13 \text{ m} \quad (57)$$

11.4.5 Aïllants tèrmics

Es important remarcar que els càlculs realitzats en els següents apartats son amb els valors de la canonada DN125-MOH-AI-100-01, que correspon a la canonada numero 1. Fins que no s'esmenti, les dades son extretes d'aquest tram.

Es necessari que totes les canonades de la planta estiguin recobertes de material aïllant. D'aquesta manera, la transferència de calor entre l'interior i l'exterior es pràcticament nul·la, i la temperatura a l'interior de les canonades es constant. Per tant, es necessari calcular el gruix del material aïllant a cada canonada (Equació 11.58)

$$d = \frac{D}{2} \left(\exp \left(\frac{\lambda}{\lambda_{ref}} \cdot \ln \frac{D+2 \cdot d_{ref}}{D} \right) - 1 \right) \quad (58)$$

On:

d: Gruix de l'aïllant (m)

D: Diametre de la canonada (m)

λ: Conductivitat termica del material aïllant ($\frac{J}{s \cdot m \cdot K}$)

λ_{ref}: Conductivitat termica de referencia ($\frac{J}{s \cdot m \cdot K}$)

d_{ref}: Diametre de referencia (m)

Per poder calcular el gruix de l'aïllant, s'assumeix un diàmetre extern de referencia de 0,035 metres i una conductivitat tèrmica de referencia de 0,04 J/s·m·K en el cas de fluids amb una temperatura inferior a 110°C. En el cas de fluids amb una temperatura superior, es seguiran els valors de la Taula 11.12.

Taula 11.12 Conductivitats tèrmiques de referència per a diverses temperatures

Temperatura Mitjana (°C)	Conductivitat tèrmica (J/s·m·K)
121	0,049
163	0,058
204	0,068

D'aquesta manera, el gruix del material aïllant es el següent:

$$d = \frac{0,141 \text{ m}}{2} \left(\exp \left(\frac{0,033 \frac{\text{J}}{\text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{K}}}{0,04 \frac{\text{J}}{\text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{K}}} \cdot \ln \frac{0,141 \text{ m} + 2 \cdot 0,035 \text{ m}}{0,141 \text{ m}} \right) - 1 \right) = 0,028 \text{ m} = 28 \text{ mm}$$

11.5 Bombes

Per poder seleccionar el tipus de bomba que es necessari segons les especificacions de procés, es procedirà al càlcul de la carrega i la potencia de la bomba.

Per realitzar els càlculs de mostra, s'agafaran les dades de la bomba P-701. Fins que no s'esmenti el contrari, totes les dades calculades en funció d'aquesta bomba.

11.5.1 Carrega hidrodinàmica

La carrega determina quants metres d'alçada ha de aportar la bomba per poder moure el fluid des de el punt d'aspiració fins al punt de descarrega (Equació 11.59)

$$h = (\Delta z) + \frac{1}{g} \left(\frac{\Delta P}{\rho} + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta v^2}{\alpha} \right) + e_{v,total} \right) \quad (59)$$

On:

h : carrega de la bomba (m)

Δz : Diferència d'alçada entre el punt 1 i 2 (m)

ΔP : Diferència de pressió entre el punt 1 i 2 (Pa)

ρ : Densitat del fluid $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$

Δv : Diferencia de velocitats $\left(\frac{m}{s}\right)$

α : factor de correcció de l'energia cinètica

$e_{v,total}$: Perdues per fricció totals $\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$

$$h = (8m - 0m) + \frac{1}{9,81 m/s^2} \left(\frac{130000 Pa - 101300 Pa}{1007 kg/m^3} + \frac{1}{2} \left(\frac{1,34^2 \frac{m}{s}}{1} - \frac{0,64^2 \frac{m}{s}}{1} \right) + 85,33 m^2/s^2 \right) = 19,67 m$$

11.5.2 Potencia de la bomba

Una vegada es determina la carrega total de la bomba, es pot calcular la potencia hidràulica de la bomba, que es la potencia que la bomba transfereix al fluid (Equació 11.60).

$$P = \rho \cdot g \cdot Q \cdot h \quad (60)$$

On:

P_h : potencia de la bomba $\left(\frac{kg \cdot m^2}{s^3}\right)$

ρ : Densitat del fluid $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$

g : acceleració de la gravetat $\left(\frac{m}{s^2}\right)$

Q : Cabal volumètric $\left(\frac{m^3}{h}\right)$

h : carrega de la bomba (m)

Les unitats la potencia de l'equació anterior equivalen al watt $\left(\frac{J}{s}\right)$, donant les unitats emprades en el sistema internacional.

$$P_h = 1007 \frac{kg}{m^3} \cdot 9,81 \frac{m}{s^2} \cdot 4,22 \frac{m^3}{h} \cdot \frac{1h}{3600s} \cdot 19,67 m = 227,827 \frac{kg \cdot m^2}{s^3} = 227,82 W$$

Tot i això, es necessari calcular la potencia real de la bomba. (Equació 11.61)

$$P_r = \frac{P_h}{\mu} \quad (61)$$

On:

P_h : potencia de la bomba (W)

P_r : potencia real de la bomba (W)

μ : rendiment de la bomba (adimensional)

Per calcular la potencia real de la bomba, s'ha de dividir l'energia que la bomba transfereix al fluid per l'eficiencia d'aquesta.

$$P_{real} = \frac{227,827 W}{0,75} = 303,76 W$$

11.5.3 Diferencia de pressió de la bomba

Es important saber la pressió que guanya el fluid al passar per la bomba. Per poder determinar aquesta pressió. (Equació 11.62)

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h \quad (62)$$

On:

ΔP : Diferencia de pressió entre el punt 1 i 2 (Pa)

ρ : Densitat del fluid $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$

g : acceleració de la gravetat $\left(\frac{m}{s^2}\right)$

h : carrega de la bomba (m)

Substituint les dades, s'obté el següent valor de la pressió a la sortida de la bomba. Aquesta equació s'obté de l'equació 11.59, però en aquest cas es menyspreen els termes de alçada, pèrdues per fricció i velocitat, obtenint l'equació 11.62

$$P_2 = 19,67 \text{ m} \cdot 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 1007 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} + 101300 \text{ Pa} = 295654,52 \text{ Pa}$$

11.6. Sistema d'impulsió d'aire

Per al que fa al disseny del sistema de captació d'aire i impulsió dins del procés s'han dissenyat dos tipus diferents de *blowers*/compressors.

Per a dissenyar els dos tipus d'equips d'impulsió, s'han realitzat els mateixos càlculs. Cal saber quin cabal és el necessari d'aire, l'increment de pressió i la potència. Els càlculs per a cada un es troben a continuació:

$$Q_1 = \frac{m_1}{\rho_1} = 43808,312 \text{ m}^3/\text{h}$$

On:

Q_1 = cabal volumètric

m_1 = cabal màssic

ρ_1 = densitat = 1,179 kg/m³

$$Q2 = \frac{m2}{\rho2} = 56714,579 \text{ m}^3/\text{h}$$

On:

$Q2 = \text{cabal volumètric}$

$m2 = \text{cabal màssic} = 55240 \text{ Kg/h}$

$\rho2 = \text{densitat} = 0,974 \text{ kg/m}^3$

$$\Delta P1 = P \text{ sortida} - P \text{ entrada} = 1,245 \text{ bar} - 1,013 \text{ bar} = 0,232 \text{ bar} = 232 \text{ mbar}$$

$$\Delta P2 = P \text{ sortida} - P \text{ entrada} = 1,3 \text{ bar} - 1,115 \text{ bar} = 0,185 \text{ bar} = 185 \text{ mbar}$$

Per a trobar la potència s'utilitza la següent fórmula i es multiplica per a un factor de marge de seguretat o sobredimensionament:

$$W1 = \frac{m1 \cdot Cp1 \cdot T1}{\eta} \cdot \left[\left(\frac{P2}{P1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] = 174,72 \text{ kW} \cdot 15\% = 200 \text{ kW}$$

On:

$$m1 = \text{cabal màssic} \left(\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right) = 7,17 \text{ kg/s}$$

$$Cp1 = \text{calor específica del gas} = 1,01 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$$

$$T1 = \text{temperatura d'entrada} = 298 \text{ K}$$

$$\gamma = \text{coeficient adiabàtic} = 1,4$$

$$\eta = \text{rendiment adiabàtic} = 0,75$$

$$W_2 = \frac{m_2 \cdot C_{p2} \cdot T_2}{\eta} \cdot \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] = 196,98 \text{ kW} \cdot 15\% = 225 \text{ kW}$$

On:

$$m_2 = \text{cabal màssic} \left(\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right) = 7,67 \text{ kg/s}$$

$$C_{p2} = \text{calor específica del gas} = 1,144 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$$

$$T_2 = \text{temperatura d'entrada} = 373,5 \text{ K}$$

$$\gamma = \text{coeficient adiabàtic} = 1,4$$

$$\eta = \text{rendiment adiabàtic} = 0,75$$

11.7. Oxidador tèrmic regeneratiu

Es detallen les formules emprades per al disseny del RTO. Es comença caracteritzant el corrent de gas d'entrada calculant el cabal molar mitjançant l'Equació 11.63.

$$F_i = \frac{\dot{m}_i}{M_i} \quad (63)$$

On:

F_i : Cabal molar del component i [kmol/h].

$\dot{m}_i$: Cabal màssic del component i [kg/h].

M_i : Massa molecular del component i [kg/kmol]

$$1,775 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = \frac{56,88 \frac{\text{kg}}{\text{h}}}{32,04 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}}$$

La suma dels cabals molars de cada component dona el cabal molar total. A partir d'aquí es calcula la fracció molat de cada component amb l'Equació 11.64.

$$y_i = \frac{F_i}{F_{\text{total}}} \quad (64)$$

On:

y_i : Fracció molar del component i

$$0,00104 = \frac{1,775}{1706,48}$$

Un cop calculades les fraccions molars, es calculen els paràmetres termodinàmics dels components. Primerament es calcula el poder calorífic inferior de la mescla (Equació 11.65)

$$PCI_{\text{mescla}} = \sum (y_i \cdot PCI_i) \quad (11.65)$$

On:

PCI_{mescla} : Poder calorífic inferior net de la corrent [Kj/kmol de gas total].

PCI_i : Poder calorífic inferior estàndard (a 25°C) del component i [Kj/kmol]

Si s'opera, queda la següent expressió:

$$1217,57 \text{ kJ/kmol} = (0,00104 \cdot 671000 \text{ kJ/kmol} + 0,0005 \cdot 561000 \text{ kJ/kmol} + 0,00084 \cdot 283000 \text{ kJ/kmol})$$

Amb el poder calorífic es possible calcular la temperatura de preescalfament del gas mitjançant l'Equació 11.66.

$$T_{\text{pre}} = T_{\text{entrada}} + \eta_{\text{th}} \cdot (T_{\text{cambra}} - T_{\text{entrada}}) \quad (66)$$

On:

T_{pre} : Temperatura del gas a la sortida del llit ceràmic i entrada a la cambra [°C].

$T_{entrada}$: Temperatura del gas de procés provinent de l'absorbidor [°C]

T_{cambra} : Temperatura objectiu de disseny de la cambra [°C]

η_{th} : Eficiència tèrmica de regeneració del llit ceràmic

Operant queda:

$$813,55 \text{ }^{\circ}\text{C} = 40^{\circ}\text{C} + 0,955 \cdot (850^{\circ}\text{C} - 40^{\circ}\text{C})$$

A continuació es calcula el salt tèrmic degut a la reacció exotèrmica d'oxidació dels COVs (Equació 11.67).

$$\Delta T_{comb} = \frac{PCI_{mescla}}{C_{p,promig}} \quad (67)$$

On:

ΔT_{comb} : Increment de temperatura teòric per la reacció d'oxidació dels COVs [°C].

$C_{p,promig}$: Capacitat calorífica mitjana de la mescla de gasos [kJ/kmol · °C]

Operant queda:

$$36,8 \text{ }^{\circ}\text{C} = \frac{1217,57 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}}{33,084 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol} \cdot ^{\circ}\text{C}}}$$

En aquest punt, es necessari calcular la temperatura final que s'assolirà sense aportació de combustible extern (Equació 11.68).

$$T_{final} = T_{pre} + \Delta T_{comb} \quad (68)$$

On:

T_{final} = Temperatura final assolida sense aportació de combustible extern ($^{\circ}C$)

Operant queda:

$$850,35\ ^{\circ}C = 813,55\ ^{\circ}C + 36,80\ ^{\circ}C$$

Un cop calculats els paràmetres termodinàmics, es dimensiona la cambra de combustió, començant per el cabal volumètric real a la temperatura de combustió (Equació 11.69)

$$Q_{real} = \frac{F_{total} \cdot R \cdot (T_{cambra} + 273.15)}{P \cdot 3600} \quad (69)$$

On:

Q_{real} : Cabal volumètric real de gas [m^3/s].

R : Constant universal dels gasos ideals , 0.08206 [$atm \cdot m^3/kmol \cdot K$].

P : Pressió d'operació [atm]

Operant queda:

$$43,65 \frac{m^3}{s} = \frac{1706,48 \frac{Kmol}{h} \cdot 0,082 \frac{atm \cdot L}{kmol \cdot K} \cdot (850,35 + 273.15)^{\circ}C}{1 atm \cdot 3600 s}$$

A partir del cabal es calcula el volum de la cambra de combustió mitjançant l'Equació 11.70.

$$V_c = Q_{real} \cdot t_{res} \quad (70)$$

On:

V_c : Volum lliure intern de la cambra de combustió [m^3].

t_{res} : *Temps de residència* [s]

Operant queda:

$$43,65 \text{ m}^3 = 43,65 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \cdot 1 \text{ s}$$

A partir del volum es determinen el diàmetre i la longitud de la cambra (Equació 11.71).

$$V_c = \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot (3D) \Rightarrow D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_c}{3\pi}} \quad (71)$$

On:

D : *Diàmetre interior lliure de la cambra cilíndrica* [m].

L : *Longitud horitzontal lliure de la cambra* [m].

Operant s'obté el següent expressió i resultat:

$$2,65 \text{ m} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 43,65 \text{ m}^3}{3\pi}}$$

Per últim falta dimensionar els llits ceràmics i el ventilador.

Primerament es calcula l'àrea transversal de la torre:

$$17,46 \text{ m}^2 = \frac{43,65 \text{ m}^3}{2,5 \text{ m}}$$

Posteriorment es calcula el diàmetre de la torre mitjançant l'Equació 11.72.

$$D_{\text{torre}} = \sqrt{\frac{4 \cdot A_{\text{torre}}}{\pi}} \text{ [m]}. \quad (72)$$

$$3,61 \text{ m}^2 = \sqrt{\frac{4 \cdot 17,46 \text{ m}^2}{\pi}} \text{ [m]}.$$

L'alçada del llit ve fixada per catàleg.

L'últim paràmetre a calcular es la potència del ventilador, per tant es necessita el cabal de gasos freds que hi entra a l'RTO (Equació 11.73)

$$Q_{\text{fred}} = Q_{\text{real}} \cdot \left(\frac{t_{\text{entrada}}}{t_{\text{cambrà}}} \right) \text{ [m}^3/\text{s]} \quad (73)$$

$$12,16 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} = 43,65 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \cdot \left(\frac{313 \text{ }^{\circ}\text{C}}{1123,35 \text{ }^{\circ}\text{C}} \right) \text{ [m}^3/\text{s]}$$

I amb el cabal es calcula la potència necessària del ventilador (Equació 11.74).

$$W_{\text{fan}} = \frac{Q_{\text{fred}} \cdot \Delta P_{\text{total}}}{1000 \cdot \eta_{\text{mec}} \cdot \eta_{\text{mot}}} \quad (74)$$

On:

W_{fan} : Potència elèctrica consumida pel motor del ventilador [kW].

ΔP_{total} : Caiguda de pressió estimada total [Pa]

η_{mec} : Rendiment mecànic del ventilador centrífug

η_{mot} : Rendiment elèctric del motor

Operant queda:

$$51,21 \text{ kW} = \frac{12,16 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \cdot 3000 \text{ Pa}}{1000 \cdot 0,75 \cdot 0,95} \zeta$$

11.8. Bescanviadors de calor

Tots els bescanviadors de calor del projecte FormalAir han estat dissenyats mitjançant el simulador Aspen Hysys, més específicament el simulador de bescanviadors de calor anomenat “EDR” (Exchanger Design and Rating). En el cas de l'exemple de càlcul que es mostrarà a continuació, es tracta el disseny del Bescanviador B-201, encarregat de l'evaporació del metanol.

Per començar amb el disseny dels bescanviadors, s'entrarà a la pestanya inicial de l'equip fent click sobre l'icona del bescanviador. S'obre una finestra com la mostrada a la Figura 11.8.

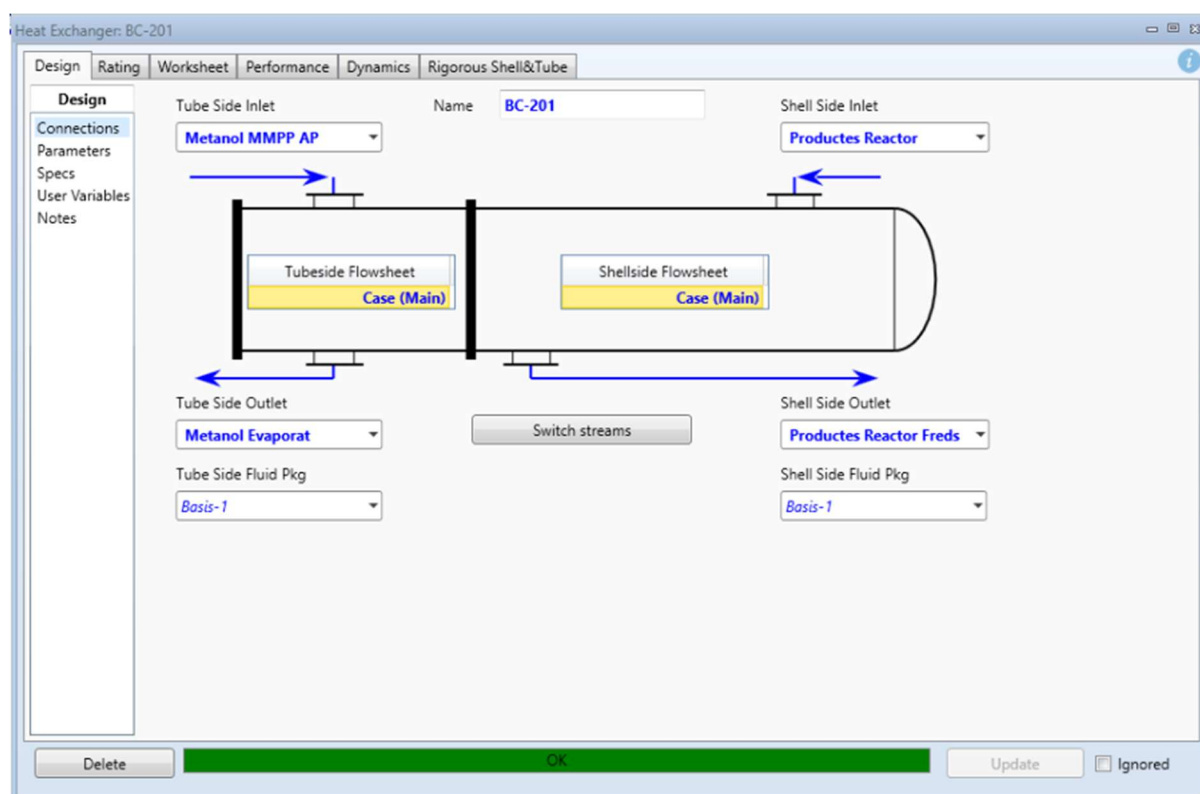


Figura 11.8. Finestra principal d'un bescanviador de calor a Aspen Hysys.

A continuació, podem seleccionar els cabals d'entrada i de sortida pel nostre bescanviador, tant per tubs com per carcassa. És important saber el tipus de fluids amb els que s'està treballant perquè serà crític a l'hora d'escollir quin circularà a través dels tubs i quin a través de la carcassa. En el exemple que es mostra en la Figura 11.8, s'ha optat per introduir el metanol a través dels tubs (entra com a líquid) i els gasos de sortida del reactor per la carcassa, degut que estan en fase gas en tot moment i d'aquesta manera pateixen una caiguda de pressió inferior.

Si passem a la pestanya anomenada “Worksheet”, es poden observar els cabals introduïts al bescanviador, amb les seves característiques (Figura 11.9). En la imatge que es mostra a continuació,

surten ja definides les condicions de pressió i temperatura per la sortida de ambdós cabals, perquè ja s'ha executat el programa, però si es comencés de nou, aquestes caselles haurien de quedar amb el text <empty>.

Worksheet	Name	Metanol MMPP A	Metanol Evaporat	Productes Reactor	Productes Reactor
Conditions	Vapour	0,0000	1,0000	1,0000	1,0000
Properties	Temperature [C]	25,02	69,13	200,8	101,4
Composition	Pressure [bar]	1,413	1,213	1,327	1,127
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	158,7	158,7	2041	2041
	Mass Flow [kg/h]	5086	5086	5,524e+004	5,524e+004
	Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/day]	964,9	964,9	9934	9934
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,394e+005	-1,993e+005	-3,879e+004	-4,191e+004
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	49,47	179,4	198,9	192,8
	Heat Flow [kW]	-1,056e+004	-8787	-2,199e+004	-2,376e+004

Figura 11.9. Pestanya *Worksheet* per un bescanviador de calor a Aspen Hysys.

A continuació, el programa demana estimar una pèrdua de pressió. Per fer-ho, s'ha de tornar a la pestanya "Design" a l'apartat "Parameters". Al fer click s'obrirà una pestanya com la que es mostra a la Figura 11.10 on es podrà especificar la pèrdua de pressió estimada para cada costat del bescanviador.

The screenshot shows the 'Heat Exchanger: BC-201' window in HYSYS. The 'Design' tab is active, and the 'Parameters' sub-tab is selected. The 'Heat Exchanger Model' is set to 'Simple End Point'. The 'Heat Leak/Loss' options are 'None', 'Extremes', and 'Proportional', with 'None' selected. The 'End Point Model' section displays the following parameters:

Overall UA [W/C]	
Overall UA [W/C]	1,889e+004

Specified Pressure Drop [bar]	
SHELL-SIDE	0,2000
TUBE-SIDE	0,2000

Use Ft	Tube Passes	Shell Passes	Shells In Series	First Pass	Shell Type
☒	2	1	1	Counter	E

Below the table, there is a section 'Convert to Rigorous Model' with a description: 'You can replace any simple exchanger model by a fully rigorous model in your simulation defining a geometry by sizing or by direct specification via input or by importing a prepared file.' Two buttons are present: 'Size Exchanger' and 'Specify Geometry'.

At the bottom of the window, there are buttons for 'Delete', 'OK', 'Update', and 'Ignored'.

Figura 11.10. Pestanya *Parameters* on es mostra el model *Simple End Point*.

Fins ara s'ha treballat en el mètode "Simple End Point", un mètode bàsic de Hysys per l'implementació de bescanviadors de carcassa i tub on només et demana les condicions d'entrada i sortida dels fluids. A continuació, es passarà al mètode estricte pel disseny de bescanviadors de carcassa i tubs, anomenat "Rigorous Shell&Tube" per canviar-ho, s'ha d'anar a l'apartat "Heat Exchanger Model", com es mostra a la Figura 11.11.

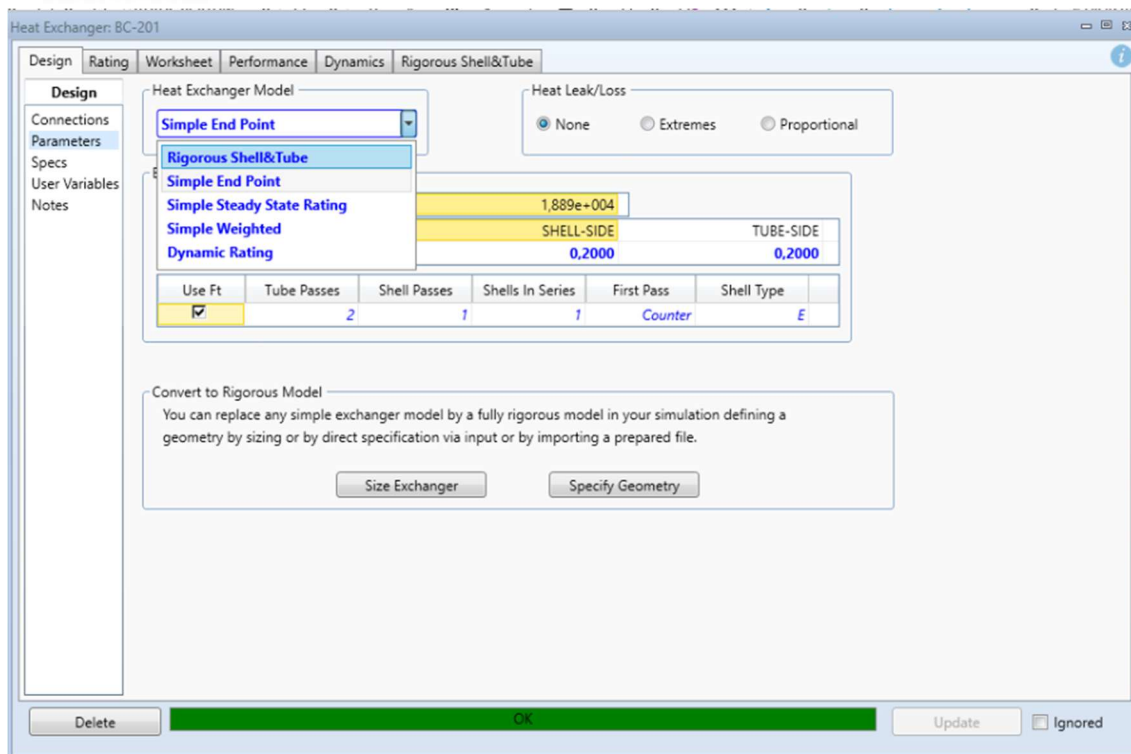


Figura 11.11. Pestanya *Parameters* per un bescanviador de calor rigorós.

A continuació, s'entrarà a la pestanya de disseny i simulació del bescanviador rigorós, per fer-ho, s'ha d'anar a la pestanya "Rigorous Shell&Tube" i fer click sobre el botó "View EDR Browser" (Figura 11.12).

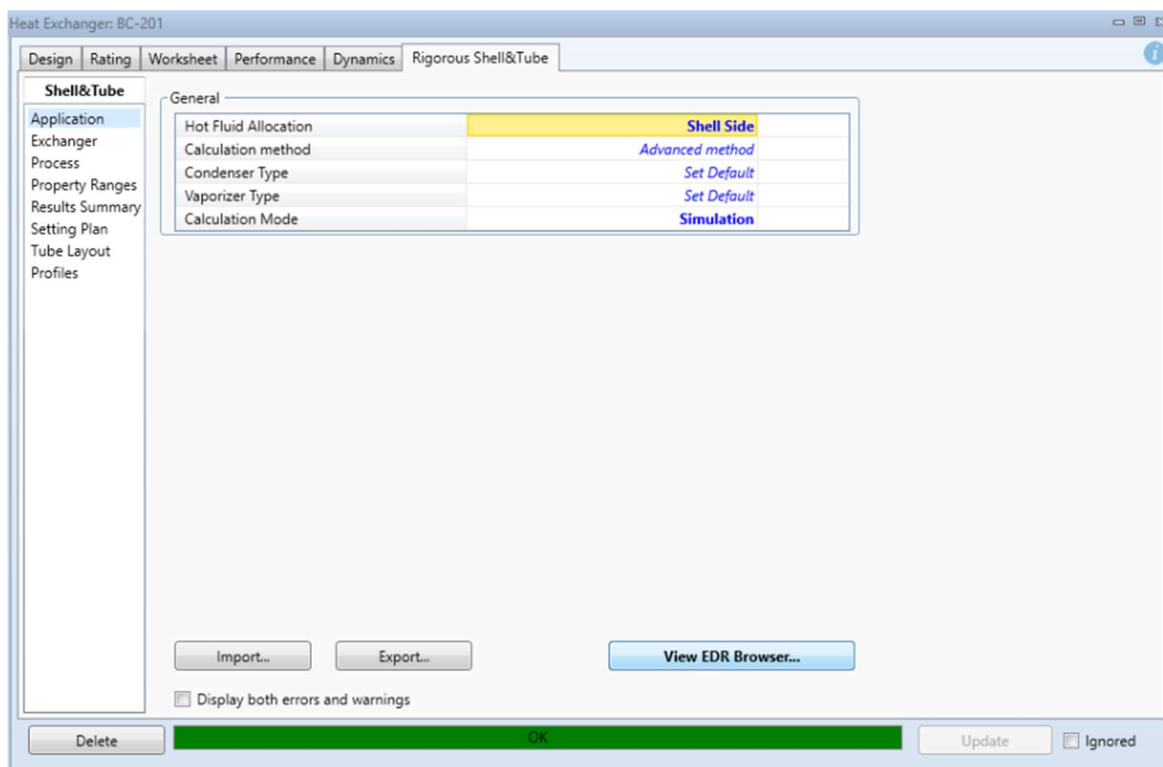


Figura 11.12. Pestanya per obrir l'EDR Browser.

Dins de la pestanya “EDR Browser” es mostren les següents opcions (Figura 11.13).

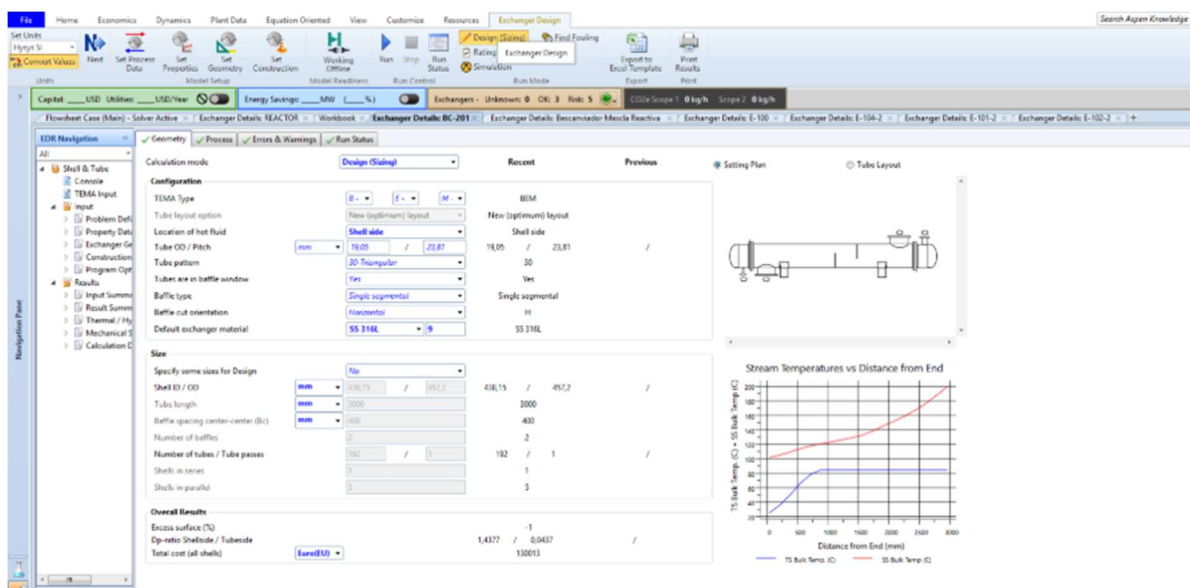


Figura 11.13. Pestanya *EDR Browser*.

En el mode “Design” es podran definir diferents paràmetres d’operació com poden ser el tipus de disposició dels tubs (en el cas de FormalAir s’ha optat en tot cas per una distribució tirangular), el material del bescanviador (AISI 316L) o la localització del fluid calent. Un cop establerts els diferents paràmetres com es mostra a la figura anterior, es dona a “run” per tal que el programa acabi de definir altres paràmetres clau de disseny.

Es passarà llavors al següent pas, la pestanya “Rating”, al clicar sobre aquesta opció, el programa ens demanarà si es desitja continuar treballant amb el mateix disseny, s’indicarà que si (Figura 11.14).

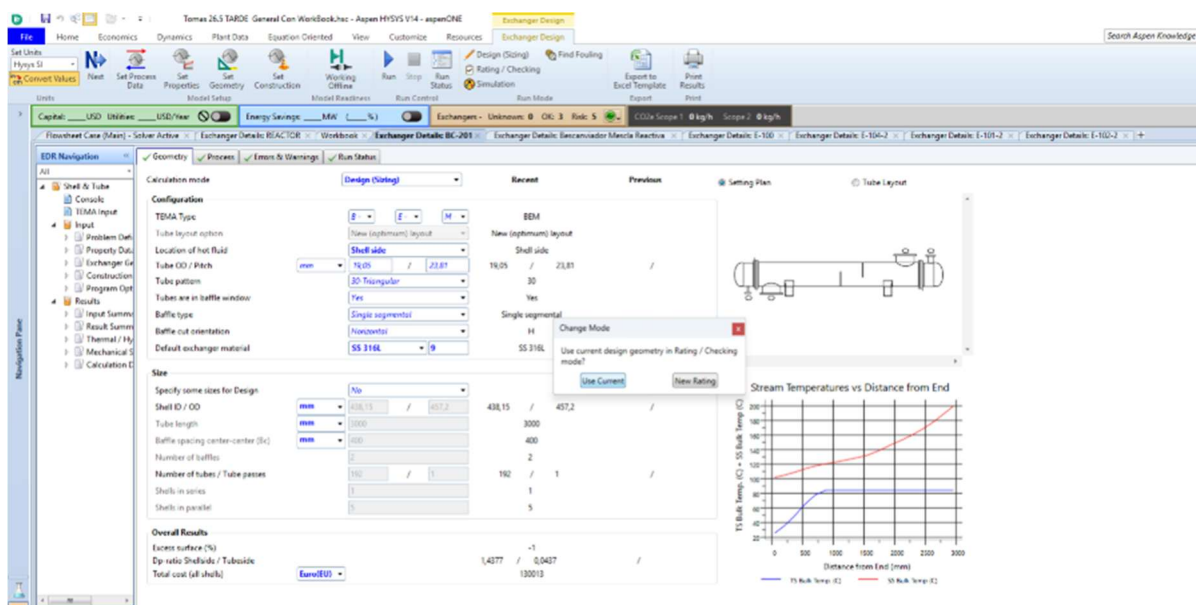


Figura 11.14. Especificacions del bescanviador de calor rigorós.

Al fer “Run” en aquesta nova pestanya, acabaran de definir-se els paràmetres restants de disseny del bescanviador. A continuació es podrà connectar el bescanviador al Flowsheet Case, com es mostra a la Figura 11.15, es podrà canviar també a la pestanya Simulation.

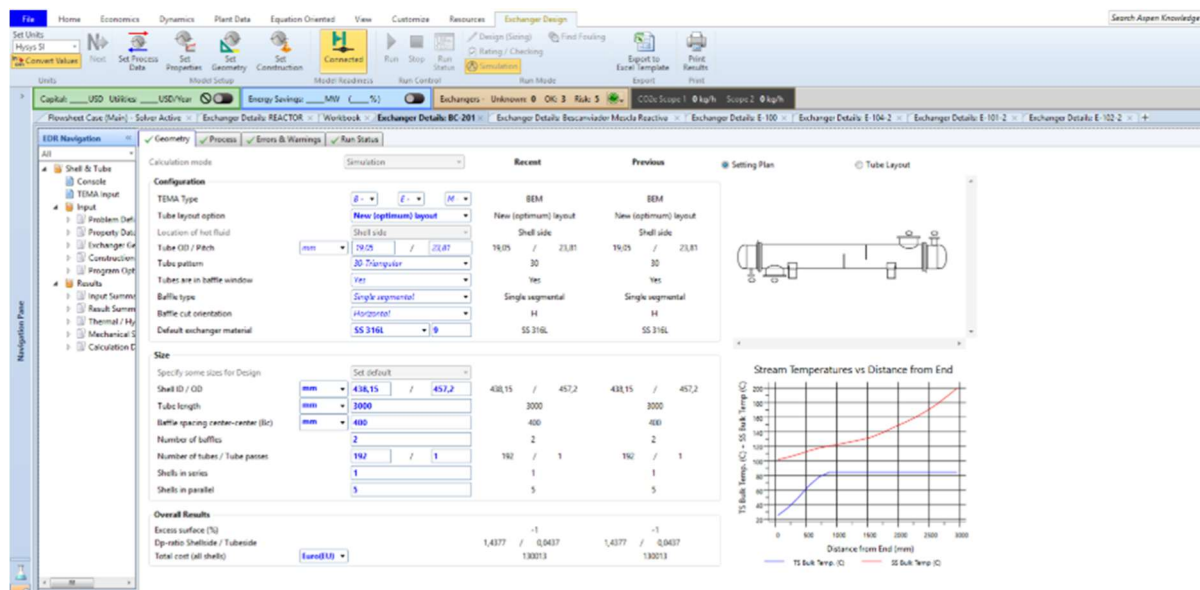


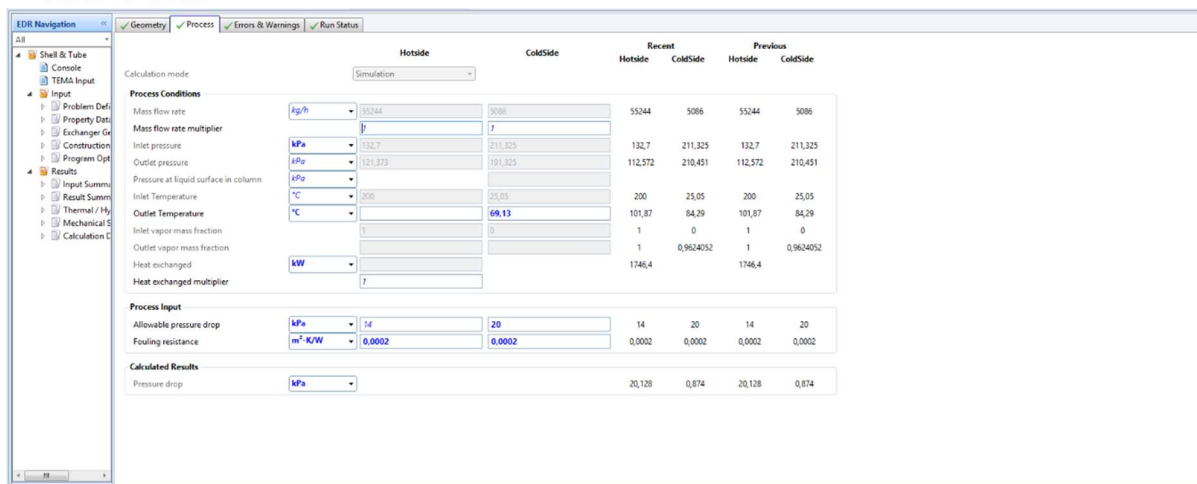
Figura 11.15. Paràmetres del bescanviador de calor en mode *Simulation*.

És molt probable que a la primera iteració s’hagin generat múltiples Errors o Warnings, aquests es poden consultar a la pestanya “Errors & Warnings”, com es mostra a la Figura 11.16.



Figura 11.16. Pestanya d’errors i advertències.

S’analitzen els errors i com es poden solucionar: Allargant els tubs, augmentant el nombre de bafles, la separació entre ells, canviant la pressió d’entrada, temperatura, cabal etc. El programa també exigeix un Fouling Factor, un paràmetre que fa referència al factor d’embrutiment, en aquest cas s’han utilitzat valors estàndard per cadascun dels fluids, 0,0002 m²·K/W. Per introduir aquesta “Fouling Resistance” s’ha d’anar a la pestanya “Process” com es mostra a la Figura 11.17.



HotSide		ColdSide		Recent	HotSide	Previous	ColdSide
Mass flow rate	55244	5086		55244	5086	55244	5086
Mass flow rate multiplier	1						
Inlet pressure	132,7	211,325		132,7	211,325	132,7	211,325
Outlet pressure	121,373	191,325		112,572	210,451	112,572	210,451
Pressure at liquid surface in column							
Inlet Temperature	200	25,05		200	25,05	200	25,05
Outlet Temperature		69,13		101,87	84,29	101,87	84,29
Inlet vapor mass fraction	1	0		1	0	1	0
Outlet vapor mass fraction				1	0,9624052	1	0,9624052
Heat exchanged	1746,4			1746,4		1746,4	
Heat exchanged multiplier	1						
Allowable pressure drop	14	20		14	20	14	20
Fouling resistance	0,0002	0,0002		0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
Pressure drop				20,128	0,874	20,128	0,874

Figura 11.17. Paràmetres de Fouling

Ara si, es pot passar a veure els resultats de disseny del bescanviador. Aquests es troben a diferents pestanyes que es detallaran a continuació.

Per saber la quantitat de calor bescanviada, s'ha d'entrar a la mateixa pestanya de process. A l'apartat "Heat Exchanged".

Per visualitzar el disseny dels bescanviadors, s'ha de navegar per les opcions de la barra vertical esquerra fins trobar l'apartat "Setting Plan" (Figura 11.18).

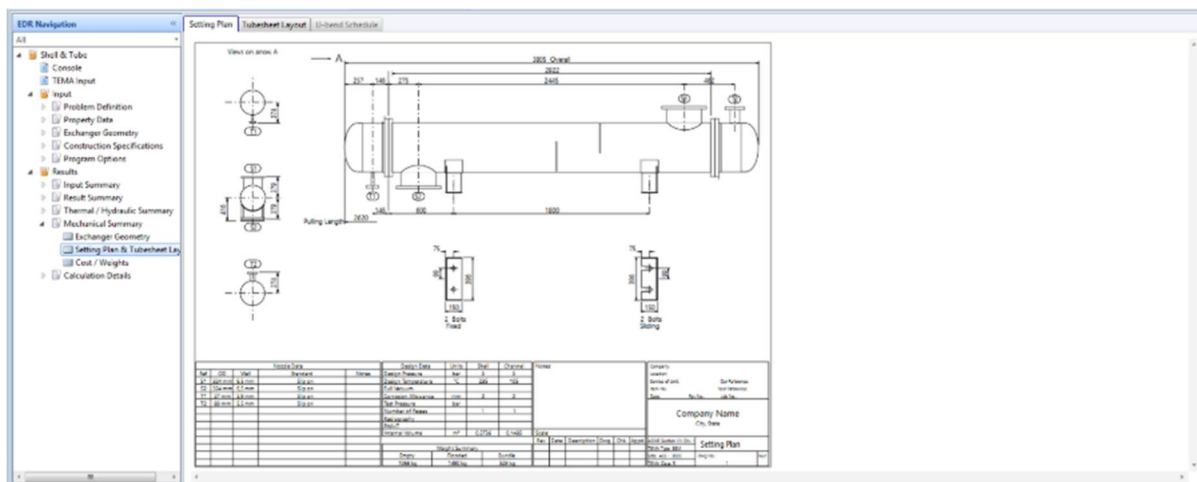


Figura 11.18. Plànols dels bescanviadors de calor.

En aquesta es trobaran els plànols del bescanviador i paràmetres de disseny, tant per la carcassa com pels tubs, d'aquesta manera acabant per complet el disseny dels bescanviador de calor de carcassa i tubs.

11.9. Serveis

Per calcular la mida dels transformadors de la planta, primer s'ha estimat el consum elèctric tant de els equips del procés com dels serveis de planta. Aquesta suma ens dona una potència activa total de 4034,091 kW

Com que a les instal·lacions industrials hi ha molts motors i equipament que fan baixar el rendiment elèctric, per fer els càlculs s'ha considerat un factor de potència de 0,65. Amb aquestes dades, ja podem obtenir la potència aparent que li demanarem a la xarxa (Equació 11.75).

$$S = \frac{P}{f} = \frac{4034,091 \text{ kW}}{0,65} = 6206,29 \text{ kVA} \quad (75)$$

On:

S = potència aparent (kVA)

P = potència activa (kW)

f = factor de potència

A l'hora de dissenyar una instal·lació d'aquest tipus no es pot anar al límit. És imprescindible deixar un marge de seguretat per poder suportar els pics de corrent quan arrenquen les màquines, possibles sobrecàrregues o futures ampliacions de la fàbrica. Per aquest motiu, s'ha aplicat un factor de sobredimensionament del 15 % al resultat anterior:

$$S_{final} = 6206,29 \text{ kVA} \cdot 15\% = 7137,38 \text{ kVA}$$

Finalment, per cobrir aquesta demanda de forma segura, s'ha decidit seleccionar dos transformadors comercials de 6300 kVA cadascun. Treballant en paral·lel ens proporcionen una capacitat total suficient per cobrir el 7137,38 kVA necessaris, assegurant una operació estable de la planta i deixant marge lliure per a possibles creixements.

11.12 Bibliografia

- [1] Fogler, H. S. (2020). *Elements of chemical reaction engineering* (6th ed.). Pearson Education.
- [2] Kutscherauer, M., & Wehinger, G. D. (2025, 1 de abril). *Particle-resolved CFD simulation of diluted catalytic fixed bed reactors for formaldehyde production*. Institute of Chemical Process Engineering, Karlsruhe Institute of Technology.
- [3] Leva, M., & Grummer, M. (1948). Heat transfer to gases through packed tubes: Effect of particle characteristics. *Industrial & Engineering Chemistry*, 40(3), 415–419.
- [4] Green, S. J., & Vener, R. E. (1955). Vapor-liquid equilibria of formaldehyde-methanol-water. *Industrial and Engineering Chemistry*, 103.
- [5] Hasse, H., & Maurer, G. (1991). Kinetics of the poly(oxymethylene) glycol formation in aqueous formaldehyde solutions. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 30(9), 2195–2200.
- [6] Malik, M. I., Abatzoglou, N., & Achouri, I. E. (2021). Methanol to formaldehyde: An overview of surface studies and performance of an iron molybdate catalyst. *Catalysts*, 11(8), 893.
<https://doi.org/10.3390/catal11080893>
- [7] Maurer, G. (1986). Vapor-liquid equilibrium of formaldehyde- and water-containing multicomponent mixtures. *AIChE Journal*, 32(6), 932–948.
- [8] Intel·ligència Artificial. *Claude*. (Versió 2026). Utilitzada per la cerca de papers i articles científics així com per la millora de la redacció.
- [9] Deutschmann, O., Knözinger, H., Kochloefl, K., & Turek, T. (2011). Heterogeneous catalysis and solid catalysts, 1. Fundamentals. En *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*. Wiley-VCH.
https://doi.org/10.1002/14356007.a05_313.pub3
- [10] Fogler, H. S. (2017). Diffusion and reaction. En *Elements of chemical reaction engineering* (Capítol 15). Pearson.
- [11] Gerberich, H. R., & Seaman, G. C. (2013). Formaldehyde. En *Kirk-Othmer encyclopedia of chemical technology*. John Wiley & Sons.
<https://doi.org/10.1002/0471238961.0615181307051802.a01.pub3>
- [12] National Academy of Sciences. (1980). *Formaldehyde: An assessment of its health effects*. Washington, D.C.
- [13] *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry* (6th ed.). (2002). Wiley-VCH.

- [14] Schaub Fernández, M. (2025). *Caracterización de catalizador Fe-Mo industrial para producción de formaldehído: Estudio de su viabilidad para reutilización en planta* [Memoria de Título, Universidad de Concepción].
- [15] Svensson, R. (2021). *Implementation of reaction kinetics into reactor model followed by validation of the reactor model* [Tesis, Lund University]. Department of Chemical Engineering.
- [16] D. Lei, J. Tang & B. Hao. (2007, 14 de noviembre). *Patente China No. CN 101070275A*. Administración Nacional de Propiedad Intelectual.
- [17] *Patente Española ES2544839T3*. (s.f.).
- [18]:Valores de la k cinètica.
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250902003585>
- [19]: Cussler, E. L. (2009). "Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems" (3rd Edition). Cambridge University Press
- [19] W.L. Mc Cabe, J.C. Smith, P. Harriot *Unit Operations of Chemical Engineering, 4th edition*. McGraw-Hill Book Company, New York (1985)
- [20] R.H. Perry, D. Green *Perry's Chemical Engineers' Handbook, 6th edition* McGraw-hill, New York (1984)
- [21] N. de Nevers *Fluid Mechanics for Chemical Engineers, 2nd edition*. McGraw-Hill, New York (1991)
- [22] Chem. Systems Inc. (1996, abril). *Formaldehyde*.